

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

Хіміко-технологічний факультет

(повна назва інституту/факультету)

Кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів

(повна назва кафедри)

«На правах рукопису»

УДК _____

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ Т. В. Бойко

(підпис)

“ _____ ” _____ 2018 р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра**

зі спеціальності **151 Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології**
Спеціалізація **Комп'ютерно-інтегровані технології сталих хімічних
виробничих комплексів**

на тему: Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору
каталізатора процесу окислювальної конденсації метану

Виконав: студент VI курсу, групи ХА-61М

(шифр групи)

_____ Шаган Дмитрій Володимирович _____

(прізвище, ім'я, по батькові)

_____ (підпис)

Науковий керівник: доц. каф. КХТП, к.т.н., доц. Бугаєва Л. М.

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

_____ (підпис)

Рецензент: _____

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

_____ (підпис)

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

Студент _____

(підпис)

Київ – 2018 року

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

Факультет _____ хіміко-технологічний _____
(повна назва)

Кафедра _____ кібернетики хіміко-технологічних процесів _____
(повна назва)

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

Спеціальність _____ 151 Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології _____
(код і назва)

Спеціалізація _____ Комп'ютерно-інтегровані технології сталих хімічних виробничих комплексів _____

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Т. В. Бойко

(підпис)

« ____ » _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студенту

_____ Шагану Дмитрію Володимировичу _____

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану _____ ,

науковий керівник дисертації Бугаєва Людмила Миколаївна, к.т.н., доц. _____ ,
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від « ____ » _____ 20__ р. № _____

2. Термін подання студентом дисертації _____

3. Об'єкт дослідження: комп'ютерно-інтегровані технології аналізу каталітичного процесу окислювальної конденсації метану.

4. Предмет дослідження: інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану.

5. Перелік завдань, які потрібно розробити: спроектувати та програмно реалізувати ІСППР для вибору каталізатора процесу ОКМ; розробити програму для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій; скласти систему для вибору каталізатора у середовищі See5; провести випробування системи;

провести комп'ютерне моделювання технологічної схеми та обрати кращий варіант.

6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: електронна презентація у середовищі MS PowerPoint.

7. Орієнтовний перелік публікацій: Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану; Використання методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора; Розроблення програми для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану за методом аналізу ієрархій; Розроблення системи підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора; Комп'ютерне моделювання процесу окислювальної конденсації метану; Моделювання технологічної схеми окислювальної конденсації метану у середовищі Chemcad; Оцінка впливу технологічного процесу – окислювальної конденсації метану на навколишнє середовище.

8. Дата видачі завдання 01 вересня 2016 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Розробка календарного плану	10.09.2016	
2	Літературний огляд за темою магістерської дисертації	12.09.2016 – 23.12.2016	
3	Визначення критеріїв, які необхідно враховувати при виборі каталізатора	13.02.2017 – 20.02.2017	
4	Проектування інтелектуальної системи підтримки прийняття рішень	21.02.2017 – 02.06.2017	
5	Побудова структури дисертації	10.07.2017 – 03.09.2017	
6	Розробка програми для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій та складання системи для інтелектуальної обробки даних	04.09.2017 – 20.10.2017	
7	Розробка системи підтримки прийняття рішень та її випробування	21.10.2017 – 25.12.2017	
8	Проведення комп'ютерного моделювання процесу та вибір варіанту схеми	20.01.2018 – 11.03.2018	
9	Проходження науково-дослідної практики	05.02.2018 – 11.03.2018	
10	Аналіз отриманих результатів	12.03.2018 – 31.03.2018	
11	Оформлення дисертації	01.04.2018 – 10.05.2018	
12	Попередній захист магістерської дисертації	11.05.2018	

Студент

_____ (підпис)

Д. В. Шаган

Науковий керівник дисертації

_____ (підпис)

Л. М. Бугаєва

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація містить: 120 с., 3 ч., 19 табл., 56 рис., 4 дод., 47 джерел.

ІНТЕЛЕКТУАЛЬНИЙ АНАЛІЗ ДАНИХ, КАТАЛІЗАТОР, МЕТОД АНАЛІЗУ ІЄРАРХІЙ, ОКИСЛЮВАЛЬНА КОНДЕНСАЦІЯ МЕТАНУ, СИСТЕМА ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ.

Об'єкт дослідження – комп'ютерно-інтегровані технології аналізу каталітичного процесу окислювальної конденсації метану.

Ціль роботи – проектування та розроблення інтелектуальної системи підтримки прийняття рішень для вибору найбільш ефективного каталізатору процесу окислювальної конденсації метану.

Методи дослідження – метод аналізу ієрархій, інтелектуальний аналіз даних, об'єктно-орієнтовне програмування, комп'ютерне моделювання.

Розглянуто процес окислювальної конденсації метану, його технологічну схему, а також альтернативні способи отримання цільового продукту. Визначено критерії, які необхідно враховувати при виборі каталізатора процесу окислювальної конденсації метану.

Розроблено програмне забезпечення для вирішення задачі вибору оптимального каталізатору. Розроблена система була випробувана на прикладах.

Проведено комп'ютерне моделювання процесу окислювальної конденсації метану з використанням різних каталізаторів та було обрано кращий варіант схеми.

Наукова новизна одержаних результатів. Система підтримки прийняття рішень містить два принципово різні підходи: перший з них базується на застосуванні методу аналізу ієрархій та потребує участі людини-експерта, другий – на методах інтелектуальної обробки даних без участі фахівця.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані результати можуть бути корисними на етапах проектування та впровадження відповідного виробництва, а також застосовуватися операторами-технологами під час протікання виробничого процесу.

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 120 с., 3 ч., 19 табл., 56 рис., 4 доп., 47 источников.

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ, КАТАЛИЗАТОР, МЕТОД АНАЛИЗА ИЕРАРХИЙ, ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ МЕТАНА, СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ.

Объект исследования – компьютерно-интегрированные технологии анализа каталитического процесса окислительной конденсации метана.

Цель работы – проектирование и разработка интеллектуальной системы поддержки принятия решений для выбора наиболее эффективного катализатора процесса окислительной конденсации метана.

Методы исследования – метод анализа иерархий, интеллектуальный анализ данных, объектно-ориентированное программирование, компьютерное моделирование.

Рассмотрен процесс окислительной конденсации метана, его технологическую схему, а также альтернативные способы получения целевого продукта. Определены критерии, которые необходимо учитывать при выборе катализатора процесса окислительной конденсации метана.

Разработано программное обеспечение для решения задачи выбора оптимального катализатора. Разработанная система была опробована на примерах.

Проведено компьютерное моделирование процесса окислительной конденсации метана с использованием различных катализаторов и был выбран лучший вариант схемы.

Научная новизна полученных результатов. Система поддержки принятия решений содержит два принципиально разных подхода: первый из них базируется на применении метода анализа иерархий и требует участия

человека-эксперта, второй – на методах интеллектуальной обработки данных (Data Mining) без участия специалиста.

Практическое значение полученных результатов. Полученные результаты могут быть полезными на этапах проектирования и внедрения соответствующего производства, а также применяться операторами-технологами во время протекания производственного процесса.

ABSTRACT

The master thesis contains 120 pages, 3 chapter, 19 tables, 56 pictures, 4 appendices, 47 sources.

DATA MINING, CATALYST, ANALYTIC HIERARCHY PROCESS, OXIDATIVE COUPLING OF METHANE, DECISION SUPPORT SYSTEM.

The object of research is computer-integrated technologies of analysis of the catalytic process of oxidative coupling of methane.

The purpose of the study is to design and develop an intelligent decision support system to choose the most efficient catalyst for the process of oxidative coupling of methane.

Research methods – analytic hierarchy process, data mining, object-oriented programming, computer simulation.

The process of oxidative coupling of methane, technological scheme and alternative ways of obtaining the target product are reviewed. The criteria that need to be taken into account when choosing a catalyst for the process of oxidation coupling of methane are determined.

The software for solving the problem of choosing an optimal catalyst is developed. The developed system was tested on examples.

A computer simulation of the process of oxidation coupling of methane using different catalysts was conducted. Also it was chosen the best version of the scheme.

Scientific novelty of the results. The decision support system contains two fundamentally different approaches: the first of these is based on the use of analytic hierarchy process and requires the participation of a human expert, the second one using methods of Data Mining without the participation of a specialist.

The practical value of the results. The obtained results can be useful at the stages of designing and implementation of the corresponding production and also used by the technology operators during the process of the production process.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ.....	12
ВСТУП.....	13
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ.....	19
1 ОКИСЛЮВАЛЬНА КОНДЕНСАЦІЯ МЕТАНУ	20
1.1 Природний газ	20
1.2 Етилен	21
1.3 Процес окислювальної конденсації метану	23
1.3.1 Реакція окислювальної конденсації метану	24
1.3.2 Механізм реакції ОКМ.....	24
1.3.3 Каталізатори реакції ОКМ.....	26
1.3.4 Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану	27
1.4 Висновки за розділом.....	29
2 СИСТЕМА ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ ДЛЯ ВИБОРУ КАТАЛІЗАТОРА	30
2.1 Розроблення системи підтримки прийняття рішень	30
2.1.1 Структура та принципи побудови інтелектуальної системи	30
2.1.2 Обґрунтування вибору програмного середовища розробки	32
2.1.3 Структура та технічні характеристики програмного модуля	33
2.1.4 Опис роботи інтелектуальних компонентів СППР	34
2.2 Метод аналізу ієрархій.....	37
2.2.1 Алгоритм реалізації методу аналізу ієрархій	38
2.2.2 Застосування методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора.....	41
2.2.3 Програма для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій	44
2.3 Видобування знань із даних та можливість побудови інтелектуальних систем на їх основі	59
2.3.1 Завдання та методи видобування знань	59
2.3.2 Деревя рішень.....	61

2.3.3 Застосування засобів інтелектуальної обробки даних для вибору каталізатора	62
2.4 Висновки за розділом	68
3 ВИБІР ВАРІАНТУ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ	69
3.1 Середовище ChemCad для комп'ютерного моделювання ОКМ.....	69
3.2 Налаштування середовища ChemCad.....	69
3.3 Складання технологічної схеми	71
3.4. Налаштування параметрів потоків і апаратів	72
3.5 Оцінювання ефективності технологічної схеми при використанні різних каталізаторів	76
3.6 Висновки за розділом	79
ВИСНОВКИ	80
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	81
ДОДАТОК А	88
ДОДАТОК Б	90
ДОДАТОК В.....	109
ДОДАТОК Г	110

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ

БД – база даних

БЗ – база знань

МАІ – метод аналізу ієрархій

ОКМ – окислювальна конденсація метану

ОПР – особа, що приймає рішення

ПО – проблемна область

РЗЕ – рідкісноземельні елементи

СППР – система підтримки прийняття рішень

λ_{\max} – максимальне власне значення

СІ – індекс узгодженості

CR – відношення узгодженості

ВСТУП

В останній чверті ХХ століття після нафтової кризи, яка вибухнула на початку 70-х років, змінився підхід до джерел вуглеводневої сировини [1]. Людство усвідомило, що запаси нафти на Землі не є безмежними і відновлюваними. Ще до появи на Землі людини природа створила величезні кількості органічних речовин, законсервувала їх, перетворивши на найбільш стійку форму, і сховала в надра землі. Після енергетичної кризи погляд нафтохіміків звернувся в сторону природного газу як альтернативного джерела вуглеводневої сировини. Розвідані запаси природного газу перевершують аналогічні запаси нафти. До того ж, значні кількості основних компонентів природного газу – метан та етан утворюються при переробці біомаси рослинного і тваринного походження, а також в процесах переробки органічної сировини. Треба зазначити, що природний газ можна віднести до поновлюваних джерел енергії і сировини.

У даний час природний газ використовується в основному в енергетичних цілях: теплові електростанції на природному газі найбільш екологічно чисті, пропан-бутанова фракція застосовується в якості побутового палива, а також як пальне для автотранспорту. У невеликих кількостях метан використовують у металургійній промисловості як відновлювач. Однак ступінь хімічної переробки природного газу в цінні продукти залишається на низькому рівні, а значна частина супутнього нафтового газу спалюється в факелах, що призводить до втрати цінної сировини і породжує складні екологічні проблеми в регіонах видобутку. Оскільки таке марнотратне ставлення до викопних джерел сировини неприпустимо, то актуальною стає задача створення нових технологій переробки легкої вуглеводневої сировини. Однією з таких технологій може стати процес окислювальної конденсації метану, що активно досліджується, як на теренах бувшого Радянського союзу [1-4], так і американськими [5], а також європейськими [6-8] дослідниками.

Переробка метану за реакцією окислювальної конденсації метану має наступні переваги:

- ✓ перетворення метану в етилен здійснюється в процесі однієї технологічної стадії на відміну від багатостадійного процесу парової конверсії метану з отриманням синтез-газу і наступному синтезу за реакцією Фішера-Тропша;
- ✓ етилен є основною сировиною нафтохімічного синтезу, з якого можна отримати широкий набір продуктів;
- ✓ реакція ОКМ протікає при атмосферному тиску на відміну від синтезу Фішера-Тропша, що вимагає, як правило, підвищених тисків.

Всі вивчені каталізатори реакції ОКМ можна розділити на дві великі групи: оксиди металів, що важко відновлюються і оксиди металів, що відновлюються. Оксиди металів являють собою носій (основна речовина, матриця) каталізатора. Як відомо, складні багатофазні каталізатори складаються з носія (підкладки) і промотора – речовини, яку додають в невеликих кількостях до носія. Приготування каталізатора здійснюється різними способами: просоченням носія розчином, що містить промотор, методом співосадження з розчинів, твердофазним синтезом і т. д. Промотор на носії позначається як Me/носії. Розрізняють також бі- та багатофункціональні каталізатори, у яких дві або більше речовин є активними компонентами каталізатора. У таких каталізаторів вказують всі активні фази, наприклад PbO/Al₂O₃.

Найбільш ефективні каталізатори дозволяють отримати селективність по C₂-продуктам, рівну 60-80%, при конверсії метану 20-30%. За економічними розрахунками Пеннінгера [9], процес ОКМ може бути рентабельним при селективності по етилену 80% і конверсії метану 25%. Розроблені каталізатори дозволяють досягти такі показники.

Не зважаючи на високий інтерес до процесу, а також на те, що механізм протікання та каталізатори реакції ОКМ вже досліджені [10-12], він

все ще досі знаходиться у вигляді експериментальної чи пілотної установки та не досяг своєї промислової реалізації.

Першу комерційну пілотну установку для прямого перетворення природного газу в етилен (ОКМ) було запущено на початку 2015 року компанією Siluria Technologies у місті Техас, США [13]. Протягом року, з моменту запуску, було успішно завершено 18 тестових випробувань, під час яких перевірено різні умови роботи, в тому числі різна температура, тиск, швидкість потоку газу на вході. Установка компанії Siluria є гнучкою до вхідної сировини, працює як на повітрі, так і на кисні, а також надає можливості щодо зміни кількості етану, шляхом створення рециклу.

Основна філософія Siluria Technologies полягає в тому, щоб випробувати величезну кількість каталізаторів використовуючи метод спроб [14]. Компанія побудувала автоматизовану систему, що містить безліч сталевих і пластикових трубок, мас-спектрометрів, невеликих печей з нержавіючої сталі та кабелів передачі даних, які можуть одночасно швидко синтезувати сотні різних каталізаторів, а потім перевірити, наскільки добре вони перетворюють метан до етилену. Під час тестових випробувань було розроблено та випробувано понад 50 тисяч каталізаторів.

У нашому дослідженні правильний підбір каталізатора сприяє кращому протіканню процесу ОКМ, а отже сприяє отриманню якісної продукції. При виборі каталізатора необхідно враховувати параметри самого процесу, такі як: температура реакції ОКМ, конверсія CH_4 , селективність C_2 -вуглеводнів, вихід C_2 -вуглеводнів та швидкість реакції, тощо [1,15].

Умови досягнення високих показників за тими чи іншими параметрами часто є суперечливими [16]. Тому проблема підбору найкращого каталізатора, як правило, є нетривіальною, важко піддається логіці однозначних рішень та вимагає використання розгалуженої стратегії прийняття компромісних рішень.

Актуальність проблеми підтверджується також тим, що близько 90% промислових хімічних і нафтохімічних виробництв застосовують ті чи інші каталізатори.

Викладене вище обумовлює актуальність обраної теми магістерської роботи, спрямованої на розроблення системи, яка б на основі зібраної інформації, технологічних евристик, а також із використанням відомих інтелектуальних методів обробки інформації, сприяла би проектуванню та впровадженню більш ефективного виробничого процесу окислювальної конденсації метану.

Об'єкт дослідження – комп'ютерно-інтегровані технології аналізу каталітичного процесу окислювальної конденсації метану.

Мета дослідження – проектування та розроблення інтелектуальної системи підтримки прийняття рішень для вибору найбільш ефективного каталізатору процесу окислювальної конденсації метану.

Методи дослідження – метод аналізу ієрархій, інтелектуальний аналіз даних, об'єктно-орієнтовне програмування, комп'ютерне моделювання.

Розглянуто процес окислювальної конденсації метану, його технологічну схему, а також альтернативні способи отримання цільового продукту. Визначено критерії, які необхідно враховувати при виборі каталізатора процесу окислювальної конденсації метану.

Розроблено програмне забезпечення для вирішення задачі вибору оптимального каталізатору. Розроблена система була випробувана на прикладах.

Проведено комп'ютерне моделювання процесу окислювальної конденсації метану з використанням різних каталізаторів та було обрано кращий варіант схеми.

Система підтримки прийняття рішень містить два принципово різні підходи: перший з них базується на застосуванні методу аналізу ієрархій та потребує участі людини-експерта, другий – на методах інтелектуальної обробки даних без участі фахівця.

Результати даної роботи можуть бути корисними на етапах проектування та впровадження відповідного виробництва, а також застосовуватися операторами-технологами під час протікання виробничого процесу.

За результатами магістерської дисертації були опубліковані наступні роботи:

1. Шаган Д. В. Комп'ютерне моделювання процесу окислювальної конденсації метану [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2017): збірник тез доповідей Десятої Української наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю, 27-29 березня 2017 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, ТОВ "Нілан-ЛТД". – 2017. – С. 234.
2. Шаган Д. В. Оцінка впливу технологічного процесу – окислювальної конденсації метану на навколишнє середовище [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали III Всеукраїнської науково-практичної конференції, 18-24 квітня 2017 р., м. Рубіжне. – Харків: Мачулін, 2017. – С. 233-235.
3. Шаган Д. В. Моделювання технологічної схеми окислювальної конденсації метану у середовищі Chemcad [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // П'ятий том збірника тез доповідей VIII Міжнародної науково-технічної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та сучасні технології», 26-28 квітня 2017 р. – Дніпро. – 2017. – С. 47-48.
4. Шаган Д. В. Використання методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2018): збірник тез доповідей Першої Міжнародної (Одинадцятої Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 27-29 березня 2018 р., м. Вінниця / Донецький

- національний університет імені Василя Стуса. – Вінниця, 2018. – С. 276.
5. Шаган Д. В. Розроблення системи підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Збірка тез доповідей VII Міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих учених з хімії та хімічної технології (11-13 квітня 2018 р., м. Київ). – Київ, 2018. – С. 196.
 6. Шаган Д. В. Розроблення програми для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану за методом аналізу ієрархій / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали IV Всеукраїнської науково-практичної конференції, 23-27 квітня 2018 р., м. Рубіжне. – Рубіжне, 2018.
 7. Шаган Д. В. Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2018: Збірник наукових статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – С. 70-72.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ

Для розкриття теми дисертації було поставлено наступні задачі:

1. Провести аналіз літературних джерел відповідно до теми магістерської дисертації.
2. Визначити критерії, які необхідно враховувати при виборі каталізатора процесу окислювальної конденсації метану.
3. Спроекувати та програмно реалізувати інтелектуальну систему підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану.
4. Розробити компонент програмної системи для вибору каталізатора, що використовує метод аналізу ієрархій та провести його випробування.
5. Створити підсистему для вибору каталізатора, що базується на методах інтелектуальної обробки даних у середовищі See5 та провести її випробування.
6. Провести комп'ютерне моделювання технологічної схеми процесу окислювальної конденсації метану з пропонованими каталізаторами, використовуючи середовище ChemCad, після чого обрати найкращий варіант процесу.

1 ОКИСЛЮВАЛЬНА КОНДЕНСАЦІЯ МЕТАНУ

1.1 Природний газ

Склад природного газу в залежності від родовища змінюється наступним чином [1,17]: метан – 55-99%, етан – 1-10%, (пропан + бутан) – до 10%, C_5 -вуглеводні і вище – 1-5%, інші – азот, вуглекислий газ, сірка, гелій.

Економічно доцільним є виділення домішок з природного газу деяких родовищ, у яких їх концентрація є високою. Виходячи з цього, початкова переробка природного газу складається з таких етапів:

- осушування і виділення газів CO_2 і H_2S та наступною їх утилізацією чи переробкою, наприклад із використанням процесу Клауса;
- відокремлення азоту та гелію із суміші;
- одержання очищеного метану;
- виробництво C_2 – C_5 -вуглеводнів або широкої фракції легких вуглеводнів.

Процеси для виділення з газових сумішей азоту, гелію та вуглекислого газу давно відомі й активно використовуються. Однак, на даний момент, процеси з отримання цінних продуктів шляхом переробки метану перебувають на дослідницькому етапі чи представлені в якості лабораторних установок.

Останнім часом, найбільш привабливими серед дослідників і підприємців залишаються такі процеси:

- одержання синтез-газу;
- пряме каталітичне перетворення метану в етилен – окислювальна конденсація метану;
- пряме каталітичне окислення метану в продукти, що містять кисень – спирти і формальдегід.

1.2 Етилен

Етилен – органічна сполука з формулою C_2H_4 , найпростіший і найважливіший представник ряду ненасичених вуглеводнів з одним подвійним зв'язком [18]. За агрегатним станом є безбарвним газом із слабким приємним запахом, трохи легший від повітря, у воді малорозчинний, а в спирті й інших органічних розчинниках розчиняється добре. З повітрям етилен, як і метан, утворює вибухові суміші. При підвищеній концентрації у повітрі надає на людей та тварин наркотичної дії.

Широкого застосування етилен набув у таких галузях:

- У виробництві етилового спирту, поліетилену, полівінілхлориду, синтетичного каучуку та інших галузях;
- При досяганні багатьох городніх та садових плодів. Отже, врожай можна збирати та перевозити ще зеленим, а потім вводити етилен до повітря складських приміщень, таким чином доводячи плоди до стиглого стану уже на місці споживання.

Крім газів крекінгу, які отримують тільки в місцях переробки нафти, за останні роки стало широко розвиватися планомірне виробництво етилену і з інших видів сировини. Сировиною для виробництва етилену є етиловий спирт, природний газ або виділена з нього метанова фракція, а останнім часом – ацетилен. Розглянемо основні способи отримання етилену [19].

1. Піроліз рідких дистилатів нафти або нижчих парафінових вуглеводнів

Реакцію зазвичай проводять в трубчастих печах при 750-900 °C і тиску 0,3 МПа. У Росії, Західній Європі та Японії сировиною служить бензин прямої перегонки. Вихід етилену становить близько 30% з одночасним утворенням значної кількості рідких продуктів, в тому числі ароматичних вуглеводнів. При піролізі газойлю вихід етилену становить 15-25%. У США основною сировиною є легкі алкани (етан,

пропан, бутан), що обумовлено їх високим вмістом в природному газі родовищ Північної Америки, при цьому вихід етилену близько 50%.

2. Каталітична дегідратація етилового спирту

В якості каталізатора дегідратації етилового спирту зазвичай застосовується окис алюмінію, робоча температура реакції знаходиться в межах 250-400 °С. Процес проводиться в реакторі, який обладнаний сорочкою для обігріву. Обігрів проводиться парами ртуті. Газ, що виходить з реактора, охолоджується, сушиться і піддається низькотемпературній ректифікації. В результаті одержують дуже чистий етилен.

3. Часткове гідрування ацетилену при атмосферному або злегка підвищеному тиску

Вихідний ацетилен не повинен містити домішки, що отруюють каталізатор. Перед переробкою ацетилен піддається очищенню на промивних установках, які зрошуються хлорною водою, потім промивається розведеним розчином лугу і сушиться. Водень також не повинен містити контактних отрут. Реактори гідрування, з'єднані в батареї, мають всередині решітки, на яких розміщується каталізатор – паладій на двоокису кремнію. Спочатку суміш ацетилену і водню нагрівають до 200 °С; в процесі гідрування температура в реакторах підтримується в межах 180-230 °С за рахунок тепла реакції і регулюється зрошенням каталізатора водою. З поступовим старінням каталізатора, реактор у міру потреби нагрівають димовими газами. Газ, який виходить з реактора, має наступний склад: 80% парів і 20% газу, що містить 50-60% етилену, 3% етану, 3% азоту, 0,8% ацетилену і близько 30% водню. Після охолодження і відділення води, сирий етилен зріджують в роздільнику Лінде і піддають низькотемпературній дистиляції. Очищений продукт містить 94-96% етилену, 3-4% етану, приблизно 1% азоту і близько 0,5% ацетилену. Етилен, що отримується з ацетилену застосовується лише для виробництва стиролу.

4. Часткове окислення етану повітрям або киснем при температурі 800 °С

Обидва гази перш за все нагрівають: етан до 650 °С, кисень до 550 °С, а потім змішують у відношенні 3:1 в невеликій камері змішання, звідки з великою швидкістю подають в основний апарат – камеру спалювання. Камера спалювання заповнена кільцями Рашига, щоб змішування газів було найкращим. Завдяки короткому часу контактування знижується утворення вуглецю і формальдегіду. Газ, що відходить з камери спалювання, який містить приблизно 33% етилену, 26.3% водню, 14.1% етану, 11.5% окису вуглецю, 7.6% метану, 4.2% азоту, 1.1% пропану, 0,7% вуглекислого газу і 0,6% кисню, охолоджують водою, сушать і після скраплення, з метою очищення, піддають низькотемпературній дистиляції на роздільник Лінде. Регенований етан знову повертають на переробку. Вихід етилену за цим методом становить 80% від теоретичного.

Єдиним виробником етилену в Україні є ТОВ “КАРПАТНАФТАХІМ”, що знаходиться у місті Калуш, Івано-Франківської області [20]. Виробництво здійснюється шляхом піролізу бензинових фракцій. Потужність установки становить 250000 тон на рік [21].

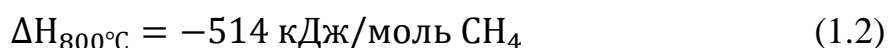
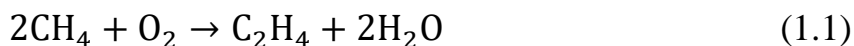
1.3 Процес окислювальної конденсації метану

Реакція окислювальної конденсації метану (ОКМ) – це хімічний процес, в якому метан (CH_4) і кисень (O_2) перетворюються в різні вуглеводні, найчастіше етилен (C_2H_4), у присутності каталізатора. Ефективними каталізаторами процесу вважаються такі, до складу яких входять літій, натрій, стронцій та барій.

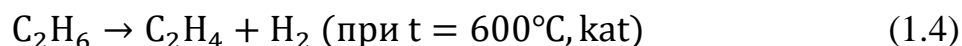
Синтез вуглеводнів з CH_4 – це каталітичний процес, що протікає з величезним виділенням тепла. Реакції протікають, в залежності від каталізатора, який використовується в процесі, при атмосферному тиску та температурах вище 700 °С.

1.3.1 Реакція окислювальної конденсації метану

Про проведення реакції прямого каталітичного перетворення метану до етилену – окислювальної конденсації метану (ОКМ) вперше стало відомо у 1980 році [15]. Реакція ОКМ каталітична і протікає при температурах вище 700 °С [22]. Процес може бути описаний рівняннями (1.1-1.2):



Однак в дійсності реакція відбувається через утворення етану, який потім піддається дегідруванню (1.3-1.4):



при цьому конверсія метану становить 20%.

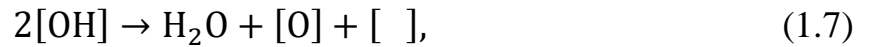
1.3.2 Механізм реакції ОКМ

На даний момент численні дослідники реакції ОКМ прийшли до єдиної думки, що ця реакція протікає по гомогенно-гетерогенного механізму. Це значить, що активація метану протікає на поверхні твердого оксидного каталізатора з відривом одного атома водню від молекули метану з утворенням CH_3 -радикалів (1.5). Рекомбінація металних радикалів відбувається в газовій фазі з утворенням молекули етану (1.6).



де $[\text{O}]$ – активний кисневий центр на поверхні каталізатора; $[\text{OH}]$ – адсорбована на поверхні каталізатора гідроксогрупа.

Далі процес протікає за наступною схемою: з двох адсорбованих гідроксогруп [ОН] утворюються молекула води і киснева вакансія на поверхні каталізатора (1.7):



де [] – киснева вакансія.

Тепер необхідно відновити активний кисневий центр. Це відбувається шляхом реокислення поверхні каталізатора киснем газової фази (1.8):



Дегідрування етану з утворенням етилену може протікати як на поверхні каталізатора, так і в газовій фазі (при температурах вище 700 °С) (1.9):



Схема протікання реакції ОКМ наведена на рис. 1.1.

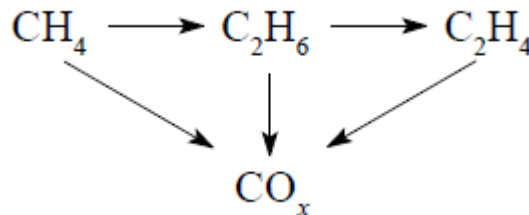


Рисунок 1.1 – Схема протікання реакції ОКМ

На рис. 1.1, CO_x – загальне позначення оксидів вуглецю CO і CO_2 . Це означає, що первинним продуктом реакції ОКМ є не тільки етан, а й оксиди вуглецю. В залежності від типу каталізатора це може бути CO або CO_2 . Звідси виникає питання щодо селективності процесу ОКМ, тобто селективності по бажаним продуктам: сумі C_2 -вуглеводнів. Селективність також залежить від типу каталізатора, але крім цієї важливої характеристики не менш важлива активність каталізатора, тобто з якою швидкістю каталізатор веде процес.

1.3.3 Каталізатори реакції ОКМ

Як вже відомо, каталізатори реакції ОКМ поділяються на дві великі групи: оксиди металів, що важко відновлюються і оксиди металів, що відновлюються.

До першої групи належать оксиди лужноземельних елементів, які промотовані лужними металами, а також оксиди тривалентних рідкісноземельних елементів (РЗЕ), як самі по собі, так і промотовані лужними або лужноземельними елементами (табл. 1.1). Промоція здійснюється методом просочування гідроксидами або солями лужних або лужноземельних металів з наступним сушінням і відпалом до розкладання солей і видалення води. Зміст промотора, як правило, не перевищує 5-7 ат. % у перерахунку на метал. При концентрації промотора більше 10 ат. % властивості каталізатора фактично визначаються властивостями фази, що утворюється на поверхні, зокрема властивостями карбонатів лужних металів.

Таблиця 1.1 – Ефективні каталізатори для процесу ОКМ

Класифікація каталізаторів	Умови проведення процесу ОКМ	Склад каталізаторів*
Оксиди металів, що важко відновлюються	Неперервний режим (спільна подача метану і кисню)	Li/MgO, La/CaO, Na/CaO, SrO, La ₂ O ₃ , Nd ₂ O ₃ , Sm ₂ O ₃ , Li/Sm ₂ O ₃ , Sr/La ₂ O ₃
Оксиди металів, що відновлюються	Періодичний режим (почергова подача метану і кисню)	Na/Mn ₂ O ₃ /SiO ₂ , Mn ₃ O ₄ /SiO ₂ , Li/NiO, PbO/Al ₂ O ₃ , Ba/CeO ₂ , Bi ₂ Mn ₄ O ₁₀ , Na/Pr ₆ O ₁₁

* Літій, натрій, стронцій та барій знаходяться у складі каталізаторів у вигляді відповідних іонів.

Перша група каталізаторів найбільш ефективно працює в безперервному режимі, тобто при одночасній подачі реагентів – метану і кисню. До другої групи каталізаторів відносяться оксиди металів, що відновлюються, і відповідно вони краще працюють в режимі окислення-відновлення, тобто в періодичному режимі. Ці каталізатори ведуть процес за

рахунок кисню решітки каталізатора з подальшою регенерацією останньої киснем газової фази. Однак промотування і цих каталізаторів лужними і лужноземельними металами сприяє підвищенню ефективності процесу.

Ефективність каталізатора визначається здатністю каталізатора активувати кисень (1.8), тобто створювати активні кисневі центри для розриву С–Н-зв'язку в молекулі метану відповідно до (1.5). При введенні одновалентної добавки в оксид дво- або тривалентного металу (або двовалентної добавки в оксид три- або чотиривалентного металу) створюються надлишкові кисневі вакансії, які служать центрами активації кисню відповідно до (1.8). Як видно з табл. 1.1, практично у всіх каталізаторах, крім оксидів тривалентних РЗЕ, створюються додаткові активні центри шляхом введення низьковалентної добавки. Оксиди РЗЕ мають структуру дефектного флюориту, в якому 25% кисневих позицій вакантні. Отже, вони здатні активувати додатковий кисень через особливості своєї структури.

1.3.4 Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану

Технологічна схема окислювальної конденсації метану може бути як без рециклу, так і з рециклом [23].

Принцип дії технологічної схеми з рециклом. Зріджений природний газ через теплообмінник 1 надходить до змішувача 2, у якому метан, що не прореагував змішується зі свіжим. Далі суміш через випарник 3 поступає до деметанізатора, де метан виділяється з суміші газів і разом з новою порцією природного газу, проходячи через теплообмінник 5, подається до реактора 7. Туди ж, за допомогою змішувача 6, надходить кисень. Температура у реакторі ОКМ становить 800 °С. Відбувається реакція окислювальної конденсації метану, після цього суміш надходить в реактор дегідрування етану 9, де використовується теплота реакції ОКМ. Реакція відбувається за температури 600 °С. Суміш, проходячи теплообмінник 10, потрапляє до

сепаратору 11, де відбувається виділення водню, води і вуглекислого газу. Далі суміш, нагріваючи свіжий метан своїм теплом у теплообміннику 1, після деметанізатора надходить в колону виділення етилену. Етан, який не прореагував, повертається до реактора дегідрування для перетворення його в етилен. Таким чином, завдяки рециркуляції (повторної подачі сировини, що не прореагувала) здійснюється повний замкнутий цикл отримання етилену з природного газу. Схема процесу окислювальної конденсації метану зображена на рис. 1.2.

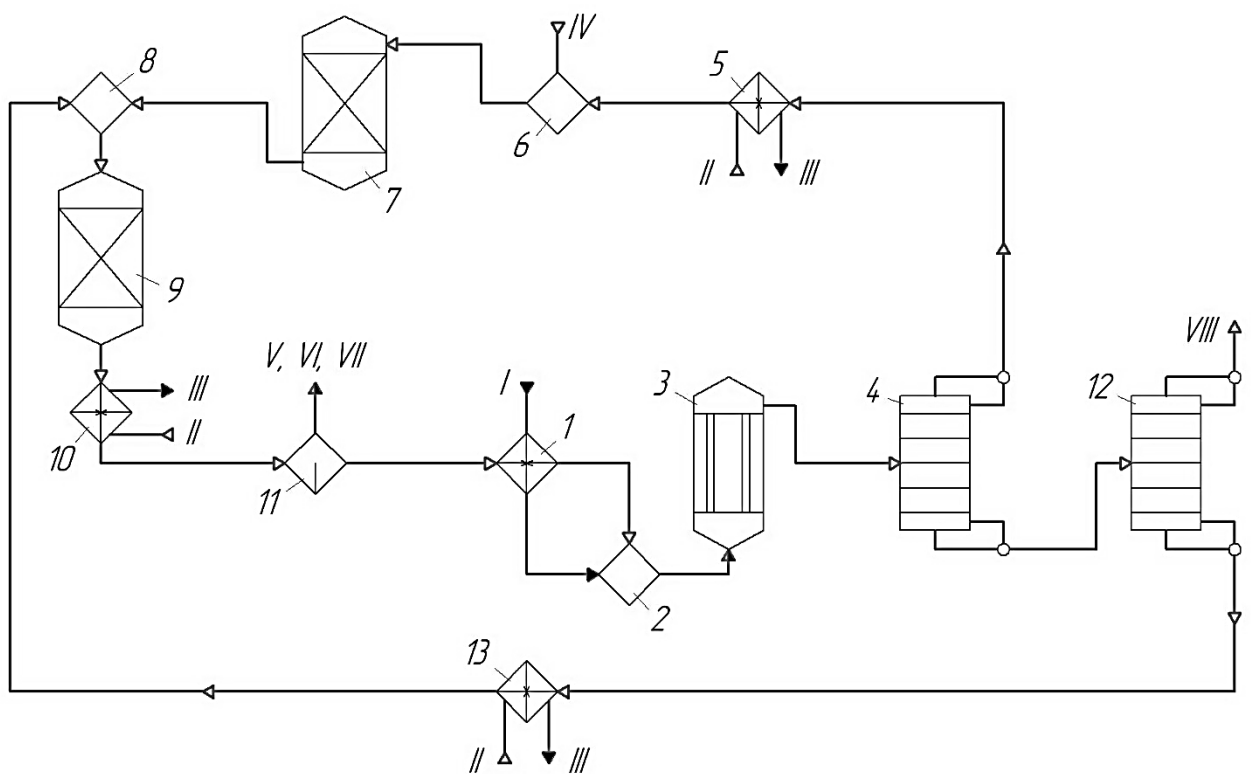


Рисунок 1.2 – Схема процесу окислювальної конденсації метану:

1, 5, 10, 13 – теплообмінники; 2, 6, 8 – змішувачі потоків; 3 – випарник;
4 – деметанізатор; 7 – реактор окислювальної конденсації метану;
9 – реактор дегідрування етану; 11 – сепаратор; 12 – колона виділення етилену.

I – зріджений природний газ; II – пара; III – конденсат; IV – кисень;

V – водень; VI – вода; VII – вуглекислий газ; VIII – етилен

1.4 Висновки за розділом

Було розглянуто процес окислювальної конденсації метану, а також альтернативні способи отримання цільового продукту. Визначено, що процес є перспективним, проте на даний момент практично не має промислової реалізації, а існує у вигляді експериментальних чи пілотних установок. Згідно з цим, доречно було б розробити систему підтримки прийняття рішень для вибору оптимального каталізатора процесу ОКМ, здатну видавати рекомендації щодо вибору каталізатора на основі збирання та аналізування експериментально отриманої інформації.

2 СИСТЕМА ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ ДЛЯ ВИБОРУ КАТАЛІЗАТОРА

Система підтримки прийняття рішень (СППР) – комп'ютеризована система, яка шляхом збору та аналізу великої кількості інформації може впливати на процес прийняття управлінських рішень в бізнесі та підприємстві [24]. Також СППР визначається як інтерактивна автоматизована система, що допомагає користувачу (ОПР) використовувати дані та моделі для ідентифікації, розв'язання задач та прийняття рішень.

2.1 Розроблення системи підтримки прийняття рішень

2.1.1 Структура та принципи побудови інтелектуальної системи

Найпростіший підхід до побудови прикладної СППР у конкретній проблемній області (ПО) включає послідовність таких кроків:

- 1) Обрати відповідне програмне середовище, яке здатне вмістити дані та знання, а також буде сумісним з іншими програмними компонентами системи.
- 2) Визначити коло компетентних технологів-експертів, які мають знання у даній ПО. За допомогою інженера по знаннях вони мають виразити словами свої знання, що будуть закладені в комп'ютерну програму.
- 3) Визначити логіку вибору найкращого рішення, на основі технічних та економічних критеріїв;
- 4) Ввести дані та знання до оболонки СППР у режимі діалогу (програма-оболонка може перевіряти спроможність та несуперечливість правил);
- 5) Перевірити можливості отриманої прикладної СППР на певних тестових задачах, рішення яких відомі експерту;
- 6) Модифікувати та розширити отриману прикладну СППР за участі інших експертів;
- 7) Здійснити передачу прикладної СППР в експлуатацію хімікам-технологам.

Для рішення поставленої задачі була спроектована та програмно реалізована інтелектуальна СППР, яка має допомогти обирати каталізатор, найбільш ефективний за даних умов процесу. Система має два основні інтелектуальні компоненти [25]. Перша з них базується на застосуванні методу аналізу ієрархій (MAI) та потребує участі людини-експерта, друга – на методах інтелектуальної обробки даних (Data Mining) без участі фахівця.

Після вирішення задачі вибору каталізатора система надає можливість комп'ютерної симуляції процесу у середовищі ChemCad.

Структура СППР для вибору каталізатора представлена на рис. 2.1.



Рисунок 2.1 – Структура системи підтримки прийняття рішень

Як видно з рис. 2.1 система взаємодіє з трьома програмами:

1. Програма для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій, що призначена для декомпозиції проблеми та поетапному встановленні пріоритетів на основі попарних порівнянь.
2. Програма See5 призначена для інтелектуальної обробки експериментально отриманих даних базуючись на дереві рішень.
3. Програма ChemCad призначена для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів [26].

2.1.2 Обґрунтування вибору програмного середовища розробки

Для розробки програмного забезпечення було обрано об'єктно-орієнтовану мову програмування C++ та середовище розробки – Microsoft Visual Studio 2015.

C++ є мовою програмування високого рівня з підтримкою декількох парадигм програмування: об'єктно-орієнтованої, узагальненої та процедурної [27]. Розроблена Б'ярном Страуструпом та спочатку називалася «Сі з класами». Стандартна бібліотека C++ включає стандартну бібліотеку Сі з невеликими змінами. Інша велика частина бібліотеки C++ заснована на Стандартній Бібліотеці Шаблонів (STL).

Вибір мови C++ обумовлений наступними її особливостями [28]:

1. Швидкодія. Швидкість роботи програми, яка написана мовою C++, не поступається іншим мовам, а в деяких випадках навіть значно переважає, тому її широко застосовують при розробці ресурсоємних доданків практично в будь-якій області.
2. Кросплатформність. Мовою C++ розробляють додатки для різноманітних платформ та систем.
3. Можливість роботи на низькому рівні з пам'яттю, адресами, портами.

Microsoft Visual Studio – серія продуктів фірми Майкрософт, які включають інтегроване середовище розробки програмного забезпечення та ряд інших інструментальних засобів. Ці продукти дозволяють розробляти як консольні програми, так і програми з графічним інтерфейсом, в тому числі з підтримкою технології Windows Forms, а також веб-сайти, веб-застосунки, веб-служби як в рідному, так і в керованому кодах для всіх платформ, що підтримуються Microsoft Windows, Windows Mobile, Windows Phone, Windows CE, .NET Framework, .NET Compact Framework та Microsoft Silverlight.

2.1.3 Структура та технічні характеристики програмного модуля

Відповідно до структури, наведеної на рис. 2.1, у середовищі Visual C++ було розроблено інтелектуальну СППР для вибору каталізатора. Програмний код основних процедур модуля наведено у додатку А.

Структура модуля складається з наступних елементів:

- файл форми – UserForm.cpp;
- файл проекту – DSS_Diploma_project_Dmitrii_Shahan.vcxproj;
- файл-заголовок – UserForm.h.

Призначення основних елементів програмного модуля наведено в таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Основні елементи програмного модуля

Елемент	Назва	Призначення
Проект (Project)	DSS_Diploma_project _Dmitrii_Shahan.vcxproj	Сукупність програмних засобів
Форма (Form)	UserForm.cpp	Основне вікно програми
Панель меню (MenuStrip)	menuStrip1	Управління кнопками
Клавіші (Button)	button_run_AHP, button_run_SEE5, button_run_CHEMCAD	Відкриття відповідної програми
Картинка (PictureBox)	pictureBox1	Графічне оформлення

Розроблений програмний модуль містить 9 процедур обробки подій, які наведені в таблиці 2.2.

Таблиця 2.2 – Процедури програмного модуля

Назва процедури	Призначення
UserForm_Load	Завантаження форми
button_run_AHP_Click	Відкриття програми для вибору каталізатора за MAI
button_run_SEE5_Click	Відкриття програми See5
button_run_CHEMCAD_Click	Відкриття програми ChemCad
відкритиБДПрограмиАНРToolStripMenuItem_Click	Відкриття бази даних програми для вибору каталізатора за MAI
відкритиБДПрограмиSee5ToolStripMenuItem_Click	Відкриття бази даних програми See5
інструкціяКористувачаToolStripMenuItem_Click	Відображення вказівок по використанню
проПрограмуToolStripMenuItem_Click	Відображення інформації про програму
завершитиРоботуToolStripMenuItem_Click	Закриття форми

Системні та програмні засоби, що використовуються програмою повинні бути представлені локалізованою версією операційної системи Windows 7 і вище. Для функціонування програми на ПК необхідно завантажити та встановити додаткове програмне забезпечення, а саме програми See5 та ChemCad.

2.1.4 Опис роботи інтелектуальних компонентів СППР

Розроблені програмні модулі призначений для вибору найкращого каталізатора процесу ОКМ за допомогою одного з підходів (MAI або Data Mining) з подальшим комп'ютерним моделюванням процесу із обраним каталізатором.

Для запуску програмної системи необхідно запустити файл DSS.exe. Після цього відкриється головне вікно програми, інтерфейс якої показаний на рис. 2.2.

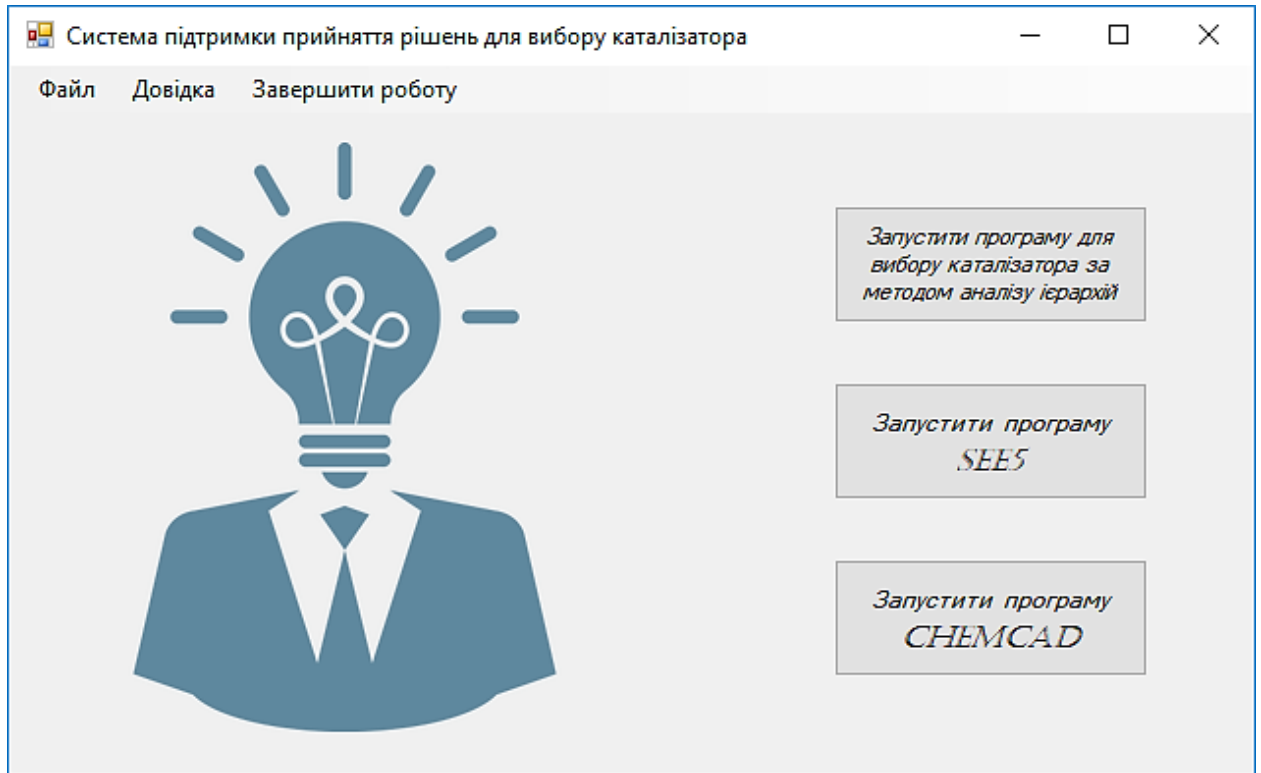


Рисунок 2.2 – Головне вікно програми (СППР)

Далі користувачеві надається можливість запустити одну з трьох програм, натиснувши відповідну клавiшу. У якості прикладу запустимо програму See5. В результаті відкриється нове вікно, як показано на рис. 2.3.

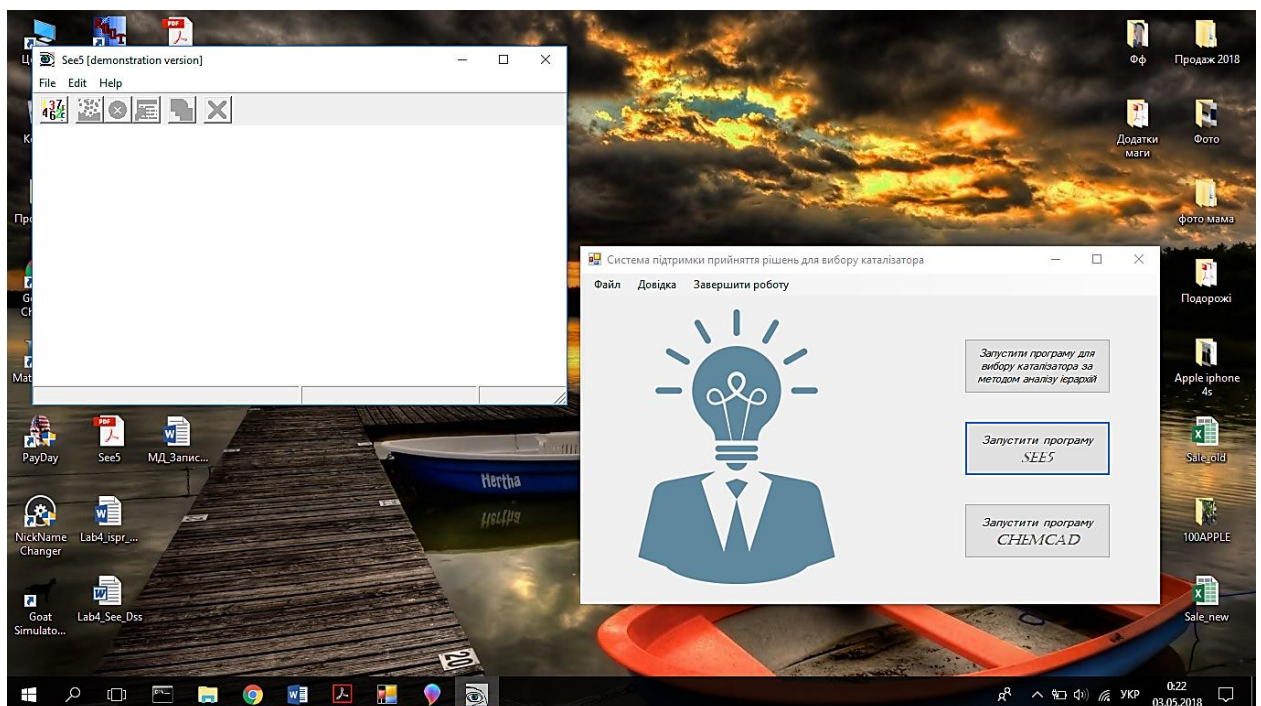


Рисунок 2.3 – Запуск програми See5

Для зручності роботи у системі передбачено панель “Меню”, як показано на рис. 2.4.

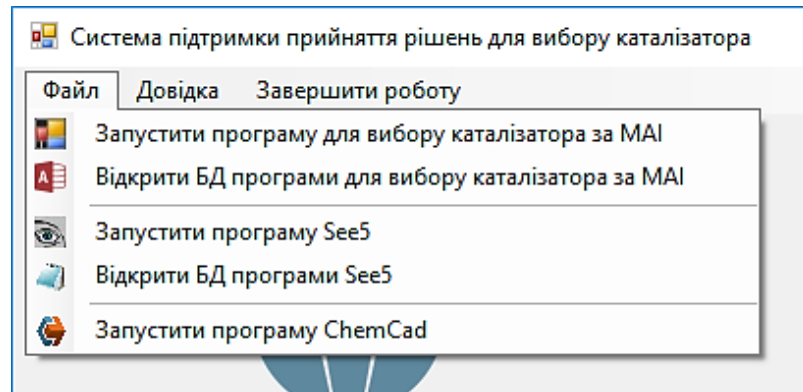


Рисунок 2.4 – Меню програми

Пункт меню “Файл” дублює можливості відкриття програм, а також надає доступ до баз даних деяких з них. Пункт “Довідка” являє собою інформаційну підтримку користувача при роботі з програмою.

Натиснувши на клавішу “Про програму” користувач отримає інформаційне вікно (рис. 2.5), що містить інформацію про назву програми, її версію, розробника, наукового керівника та рік виходу програми.

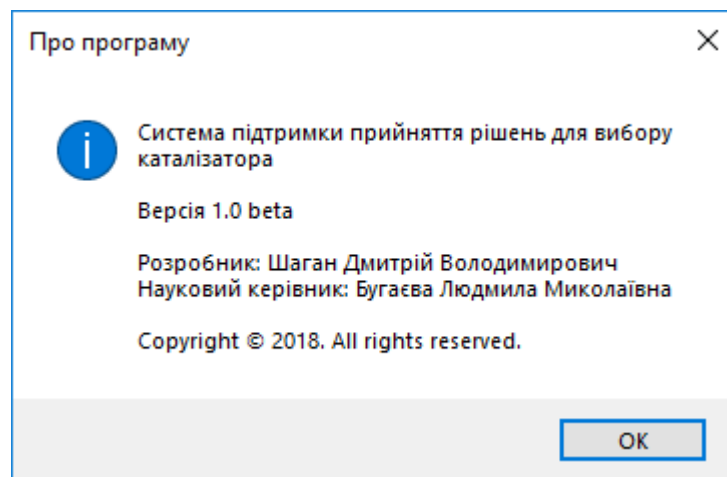


Рисунок 2.5 – Інформаційне вікно “Про програму”

Натиснувши на клавішу “Інструкція користувача” користувач отримає інформаційне вікно (рис. 2.6), що містить опис доступних для запуску програм.

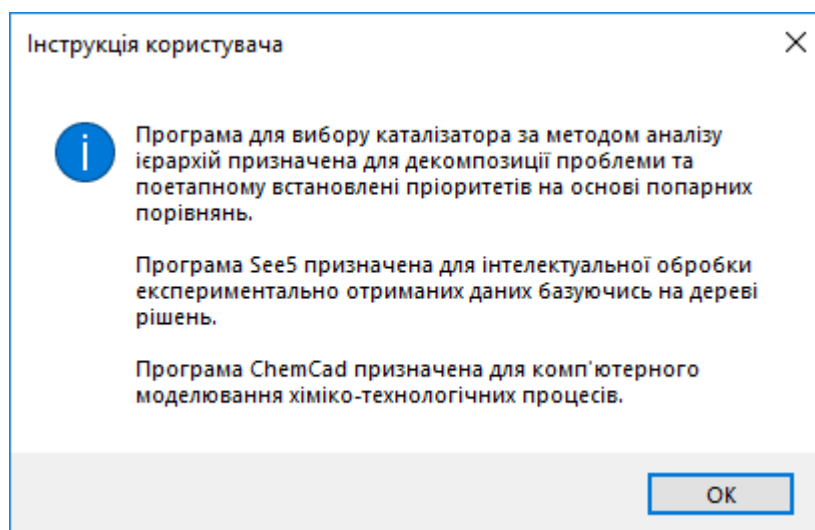


Рисунок 2.6 – Інформаційне вікно “Інструкція користувача”

Вихід з програми здійснюється шляхом натискання клавіші “Завершити роботу” на панелі “Меню” або хрестика у правому верхньому кутку програми.

Розглянемо детальніше компоненти програми у наступних підрозділах.

2.2 Метод аналізу ієрархій

Завдання прийняття рішення вимагає порівняння альтернатив і вибору кращої з них [29]. Порівнювати альтернативи легко, коли їх характеристика подається однією величиною, вираженою у сильній шкалі, наприклад, у шкалі відношень. Тоді перевагою альтернативи над іншою є відношення величин. Як правило, альтернативи мають не одну, а декілька характеристик і розмірність їх різна: гривні, метри, години, тони. Характеристики альтернатив можуть бути і якісними. Порівнювати такі альтернативи важко, адже необхідно врахувати всі характеристики. Тому при наявності у альтернатив багатьох характеристик, поданих у різних кваліметричних шкалах, потрібний зручний метод, який дозволив би одержати обґрунтоване співвідношення між альтернативами порівняння.

Для вибору альтернативи часто використовують експертні оцінки. Але експертам також важко вибрати одну альтернативу з багатьох при множині різних характеристик. Одним з кращих систематичних методів вирішення

проблеми вибору в таких випадках є метод аналізу ієрархій [30]. Цей метод полягає в тому, що при наявності багатьох альтернатив, коли дати реальну оцінку кожній з них важко, порівнюють попарно дві альтернативи між собою і віддають перевагу тій чи іншій.

2.2.1 Алгоритм реалізації методу аналізу ієрархій

Метод аналізу ієрархій складається із наступної сукупності етапів:

1. Структуризація задачі у вигляді ієрархічної структури [31].

Мета складає найвищий рівень ієрархії. На цьому рівні може знаходитися лише один об'єкт. На наступному нижчому рівні знаходяться критерії. На основі цих критеріїв оцінюються об'єкти, що порівнюються, які називаються альтернативами. Альтернативи розміщуються на самому нижньому рівні. Зазвичай розглядаються трьох рівневі ієрархії, рідше – чотирьох рівневі.

2. Винесення експертних суджень на кожному рівні ієрархії за парними порівняннями.

Припустимо, існує множина можливих альтернатив $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, серед яких потрібно обрати оптимальний, і $\tilde{G} = \{\tilde{G}_1, \tilde{G}_2, \dots, \tilde{G}_m\}$ – множина кількісних і якісних критеріїв, якими оцінюються альтернативи. Упорядкуємо елементи множини V за критеріями з множини \tilde{G} .

Для кожної пари елементів універсальної множини експерт або ОПР оцінює перевагу одного елемента над іншим по відношенню до властивості нечіткої множини. Парні порівняння зручно представляти наступної матрицею [32]:

$$A = \begin{matrix} & v_1 & v_2 & \dots & v_n \\ v_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ v_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_n & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{matrix},$$

де a_{ij} рівень переваги v_i елемента над v_j ($i, j = \overline{1, n}$), що визначається за дев'ятибальною шкалою Сааті:

1 – якщо відсутня перевага елемента v_i над елементом v_j ;

3 – якщо є слабка перевага v_i над v_j ;

5 – якщо є істотна перевага v_i над v_j ;

7 – якщо є явна перевага v_i над v_j ;

9 – якщо є абсолютна перевага v_i над v_j ;

2, 4, 6, 8 – проміжні порівняльні оцінки.

Матриця попарних порівнянь має наступні властивості:

- вона діагональна, тобто $a_{ii} = 1, i = \overline{1, n}$;
- вона антисиметрична, тобто елементи, симетричні щодо головної діагоналі, пов'язані залежністю $a_{ij} = 1/a_{ji}, i, j = \overline{1, n}$;
- вона транзитивна.

3. Обчислення локальних пріоритетів для елементів кожного рівня та перевірка узгодженості суджень.

Вектор локальних пріоритетів розраховується за наступним алгоритмом:

1) Визначення власного вектору матриці:

$$w_i = \sqrt[n]{\prod_{j=1}^n a_{ij}}$$

2) Обчислення нормованих значень вектору:

$$v_i = \frac{w_i}{\sum_{i=1}^n w_i}$$

3) Розрахунок власного максимального власного значення матриці:

$$\lambda_{max} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} v_i$$

де λ_{max} – максимальне власне значення, що використовується для оцінки узгодженості, яка відображає пропорційність переваг.

4) Визначення індексу узгодженості:

$$CI = \frac{\lambda_{max} - n}{n - 1}$$

де CI – індекс узгодженості, тобто величина відхилення від узгодженості.

5) Визначення випадкового індексу, тобто індексу узгодженості згенерованої випадковим чином за шкалою від 1 до 9 зворотньо-симетричної матриці з відповідними зворотними величинами елементів визначається з табл. 2.3:

Таблиця 2.3 – Значення випадкового індексу

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
P_n	0,00	0,00	0,58	0,90	1,12	1,24	1,32	1,41	1,45	1,49

б) Розрахунок відношення узгодженості:

$$CR = \frac{CI}{P_n}$$

Якщо $CR \leq 0,1$ то воно вважається припустимим.

4. Обчислення глобальних пріоритетів та визначення найкращої альтернативи.

Вектор глобальних пріоритетів можна отримати за наступною формулою:

$$\lambda_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mu_j v_{ij}$$

Кращою вважається альтернатива з максимальним значенням пріоритету [33].

2.2.2 Застосування методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора

Задачу вибору каталізатора, який є необхідним компонентом протікання процесу ОКМ, можна розглядати як задачу прийняття рішення, відповідно, для прийняття рішень можливе застосування МАІ. Аналіз літературних джерел [1,15] показує, що каталізатор процесу ОКМ характеризується наступними п'ятьма критеріями: температура, конверсія CH_4 , селективність C_2 -вуглеводнів, вихід C_2 -вуглеводнів, швидкість реакції.

Загальна структура процесу вибору каталізатора може бути представлена в ієрархічній формі (рис. 2.7), яка містить три рівні [34]:

1. Мета – короткий опис задачі;
2. Критерії – кількісна чи якісна характеристика, суттєва для суджень про об'єкт;
3. Альтернативи – об'єкти, між якими необхідно зробити вибір.

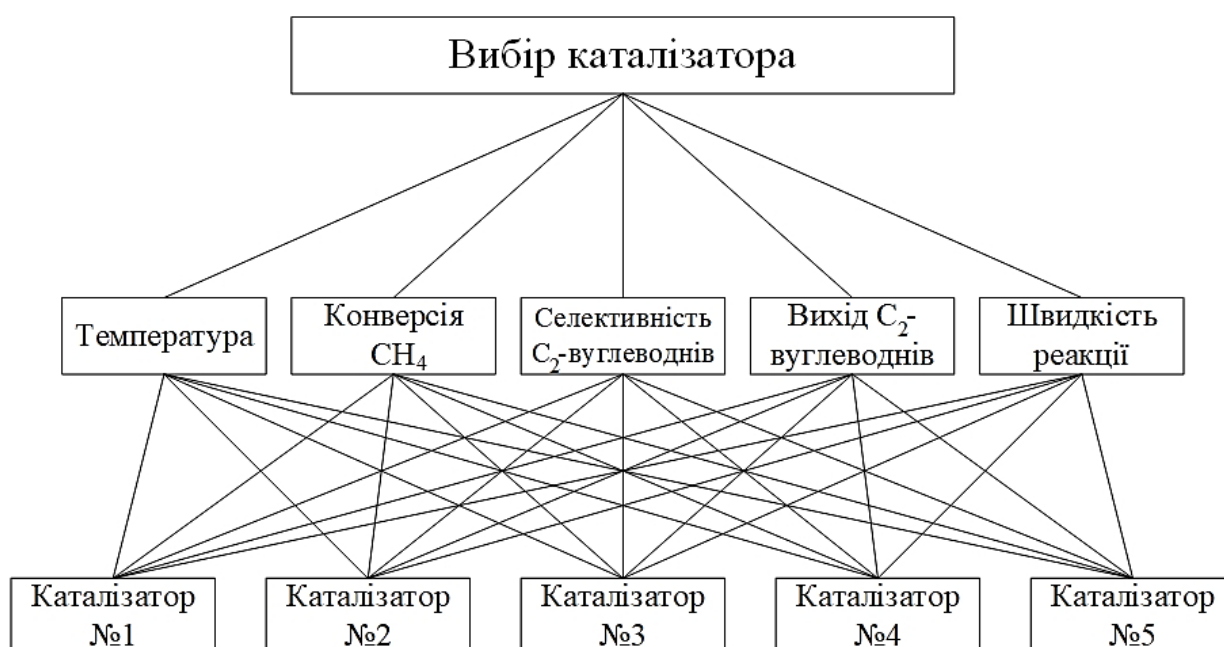


Рисунок 2.7 – Ієрархічна структура вибору каталізатора

У табл. 2.4 наведено найбільш широко досліджувані каталізатори процесу окислювальної конденсації метану та їх показники.

Таблиця 2.4 – Каталізатори процесу окислювальної конденсації метану

Каталізатор	Температура, °C	Конверсія CH ₄ , %	Селективність C ₂ -вуглеводнів, %	Вихід C ₂ -вуглеводнів, %	Швидкість реакції, молек/м ² ·с
PbO/MgO	700	13,1	56,2	7,2	3·10 ¹⁹
Bi ₂ O ₃	800	21	66,8	14	6·10 ¹⁷
La ₂ O ₃	750	12,2	67,4	8,3	5,5·10 ²⁰
Nd ₂ O ₃ /MgO	770	26	46	11,2	1,2·10 ¹⁹
Ca-руда	870	28	77,5	22,2	2,7·10 ¹⁷
MgO	750	29	50	14,5	5·10 ¹⁶
Li/MgO	700	34	58	20	4·10 ¹⁷
LiCl/MnO ₂	750	47,2	64,7	30,8	7·10 ¹⁹
BaPbO ₃	800	22	62,7	14	4,5·10 ¹⁷
SrCe _{0,9} Yb _{0,1}	750	53	60	31,6	2,5·10 ¹⁹
Ba ₂ Sb(LaBi)O ₆	850	41,6	43,5	18,1	1·10 ¹⁹
KBi ₃ O ₄ F ₂	750	23,8	82,3	19,5	6·10 ¹⁷
LiCa ₂ Bi ₃ O ₄ Cl ₆	720	41,7	46,5	19,3	7·10 ¹⁷

На основі суджень експерта або ОПР будуються матриці попарних порівнянь на кожному рівні по відношенню до кожного критерію вищого рівня (табл. 2.5 – 2.10).

При порівнянні двох об'єктів за будь-яким критерієм експерт користується заздалегідь визначеною дев'ятибальною шкалою.

Таблиця 2.5 – Матриця попарних порівнянь критеріїв

Критерії	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Температура	1	0,2	0,2	0,143	0,33
[2] Конверсія CH ₄	5	1	2	0,5	0,33
[3] Селективність C ₂ -вуглеводнів	5	0,5	1	0,5	0,33
[4] Вихід C ₂ -вуглеводнів	7	2	2	1	2
[5] Швидкість реакції	3	3	3	0,5	1

Таблиця 2.6 – Матриця попарних порівнянь за відношенням до критерію “Температура”

Альтернативи	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Bi_2O_3	1	0,2	0,2	0,143	0,2
[2] La_2O_3	5	1	1	0,33	1
[3] MgO	5	1	1	0,33	1
[4] Li/MgO	7	3	3	1	3
[5] LiCl/MnO_2	5	1	1	0,33	1

Таблиця 2.7 – Матриця попарних порівнянь за відношенням до критерію “Конверсія CH_4 ”

Альтернативи	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Bi_2O_3	1	5	0,5	0,33	0,2
[2] La_2O_3	0,2	1	0,33	0,25	0,111
[3] MgO	2	3	1	0,5	0,25
[4] Li/MgO	3	4	2	1	0,33
[5] LiCl/MnO_2	5	9	4	3	1

Таблиця 2.8 – Матриця попарних порівнянь за відношенням до критерію “Селективність C_2 -вуглеводнів”

Альтернативи	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Bi_2O_3	1	1	6	3	2
[2] La_2O_3	1	1	6	3	2
[3] MgO	0,167	0,167	1	0,33	0,2
[4] Li/MgO	0,33	0,33	3	1	0,33
[5] LiCl/MnO_2	0,5	0,5	5	3	1

Таблиця 2.9 – Матриця попарних порівнянь за відношенням до критерію “Вихід C_2 -вуглеводнів”

Альтернативи	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Bi_2O_3	1	5	1	0,33	0,143
[2] La_2O_3	0,2	1	0,2	0,167	0,111
[3] MgO	1	5	1	0,33	0,143
[4] Li/MgO	3	6	3	1	0,25
[5] LiCl/MnO_2	7	9	7	4	1

Таблиця 2.10 – Матриця попарних порівнянь за відношенням до критерію “Швидкість реакції”

Альтернативи	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
[1] Bi_2O_3	1	0,143	2	1	0,2
[2] La_2O_3	7	1	9	7	2
[3] MgO	0,5	0,111	1	0,5	0,167
[4] Li/MgO	1	0,143	2	1	0,2
[5] LiCl/MnO_2	5	0,5	6	5	1

Далі слід запуснути програму для оцінювання каталізаторів за методом аналізу ієрархій.

2.2.3 Програма для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій

Розроблена програма призначена для визначення локальних та глобальних пріоритетів каталізаторів за вказаними критеріями, їх графічної візуалізації, а також отримання рекомендації щодо вибору оптимального каталізатора процесу ОКМ [35]. Програмний код наведений у додатку Б.

Структура програми для вибору каталізатора за МАІ представлена на рис. 2.8.

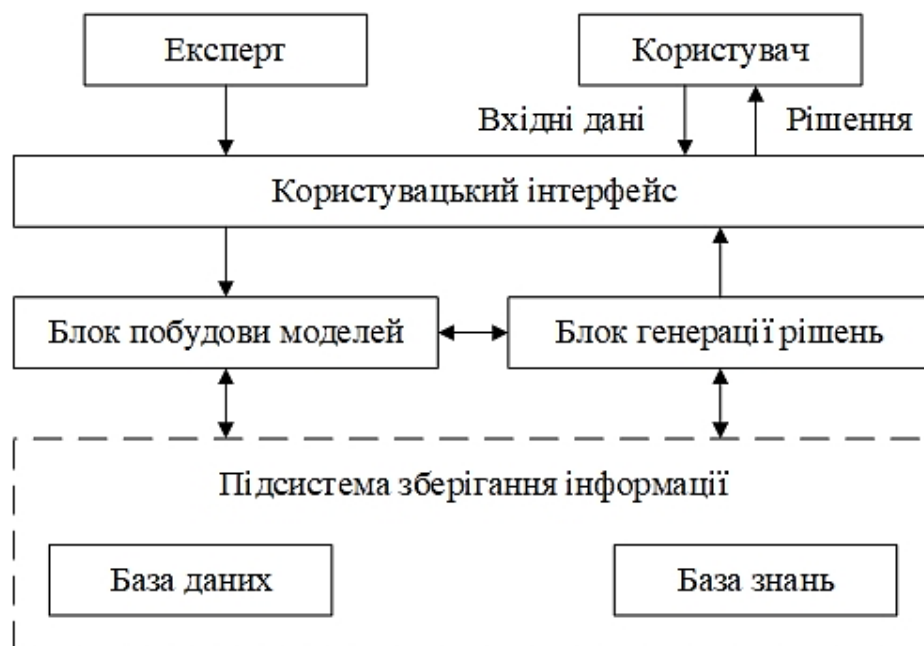


Рисунок 2.8 – Структура програми для вибору каталізатора за МАІ

Згідно з рис. 2.8 можна виділити наступні структурні елементи [36]:

1. Експерт – це висококваліфікований, досвідчений фахівець у галузі хімії.
2. Користувач – це особа, що приймає рішення щодо вибору оптимального каталізатора процесу, наприклад, оператор-технолог.
3. Блок генерації рішень – пояснючий модуль, як система отримала рішення, виносить рекомендації щодо оптимального каталізатора процесу.
4. Блок побудови моделей – програма, що реалізовує послідовність дій для вирішення завдання на основі інформації з бази даних і бази знань. Для побудови програми вибору каталізатора пропонується використовувати метод аналізу ієрархій.
5. Підсистема зберігання інформації. Містить базу знань, яка призначена для зберігання довгострокової інформації та використовується для побудови математичних моделей і бази даних, у якій зберігається оперативна інформація, вихідні та поточні значення.

Після запуску відкривається вікно програми, інтерфейс якого наведений на рис. 2.9.

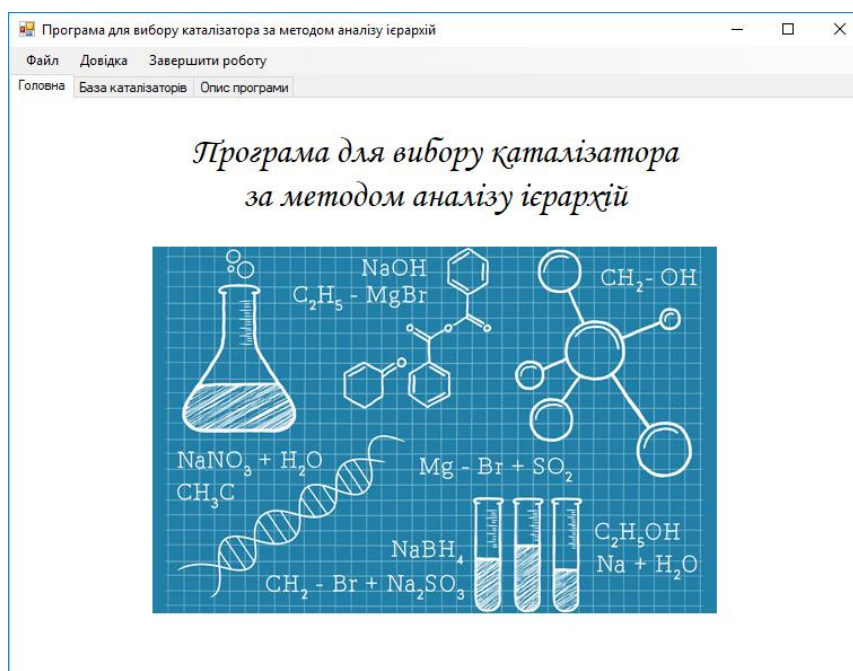


Рисунок 2.9 – Головне вікно програми

Як видно з рис. 2.9, головне вікно містить три вкладки – “Головна”, “База каталізаторів” та “Опис програми”.

На вкладці “База каталізаторів” розміщена таблиця з каталізаторами та основні кнопки керування базою даних (рис. 2.10).

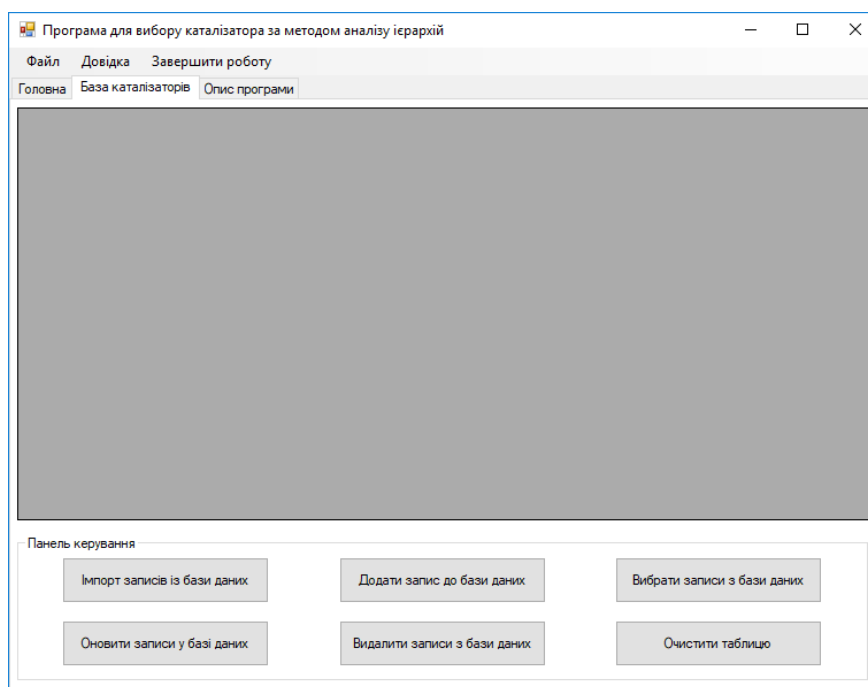


Рисунок 2.10 – Вікно СУБД

Для отримання записів із БД необхідно натиснути клавішу “Імпортувати записи з бази даних”, як показано на рис. 2.11.

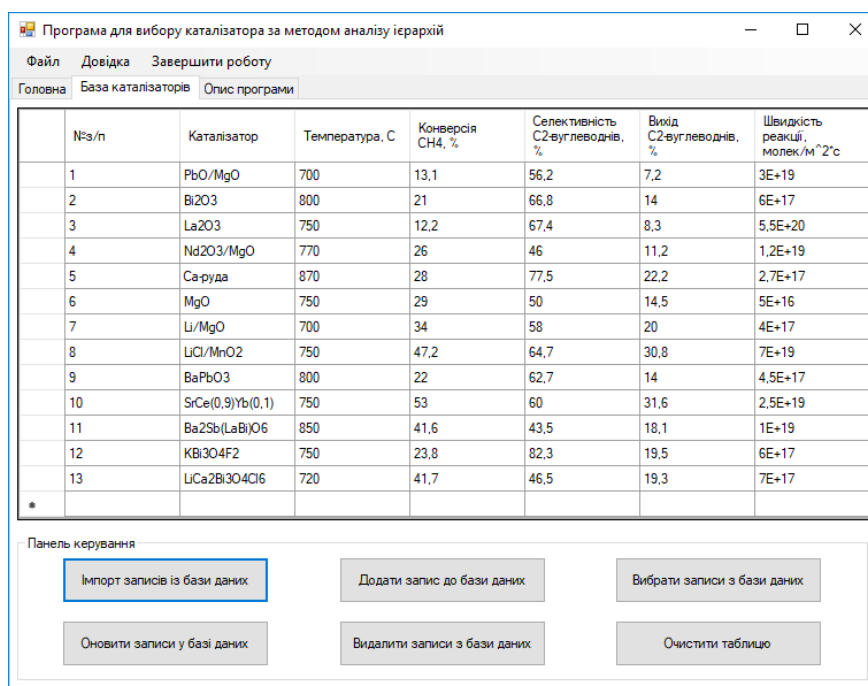


Рисунок 2.11 – Імпортувати записів із бази даних

Для редагування існуючих записів необхідно зробити виправлення у таблиці та натиснути клавішу “Оновити записи у базі даних”, як на рис. 2.12.

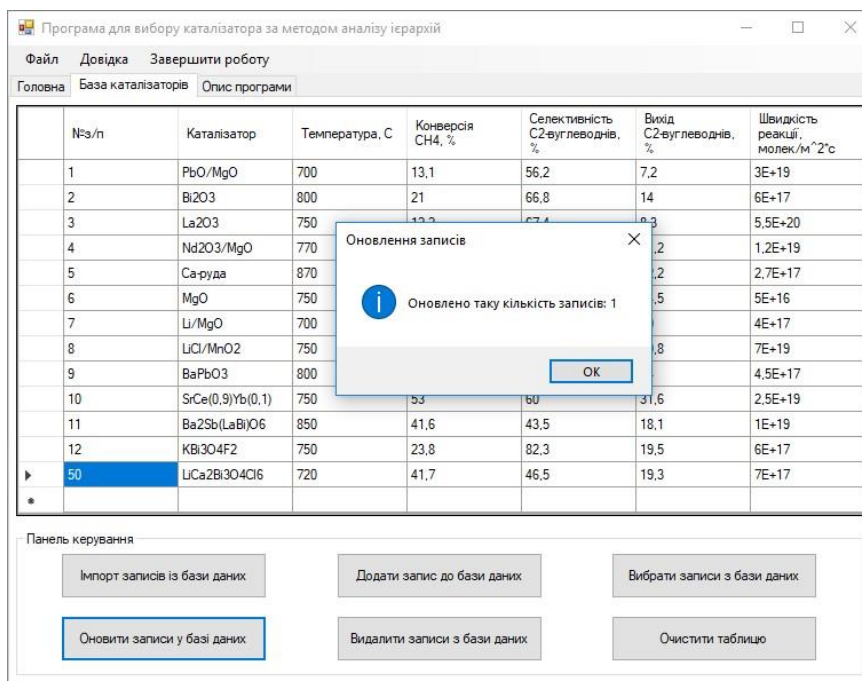


Рисунок 2.12 – Оновлення записів у базі даних

У тому випадку, якщо редагування не було зроблено, програма відобразить відповідне інформаційне повідомлення (рис. 2.13).

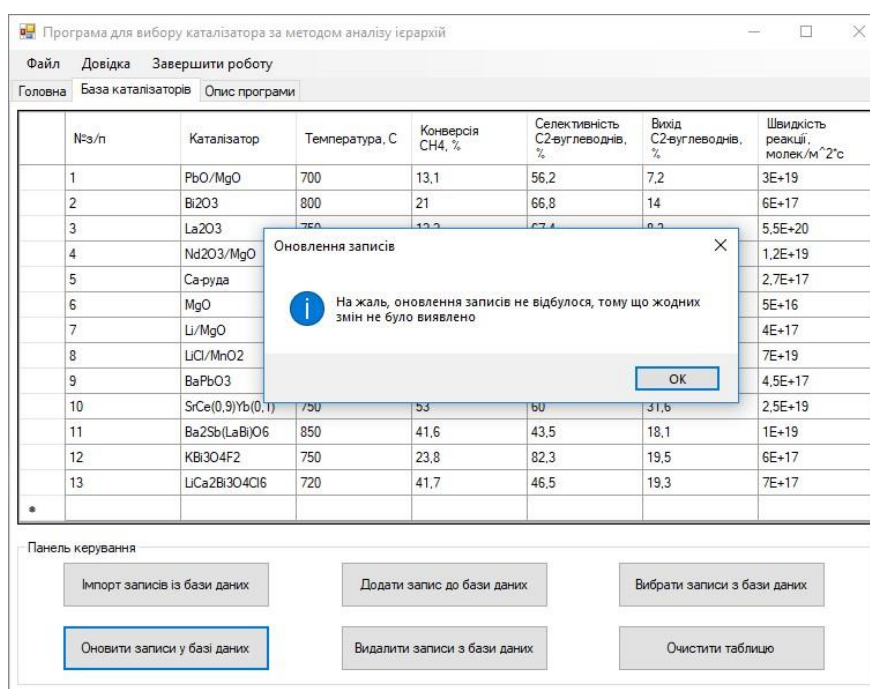


Рисунок 2.13 – Інформаційне повідомлення про оновлення записів

Для додавання запису необхідно натиснути клавішу “Додати запис до бази даних” та заповнити вікна, що впливають (рис. 2.14).

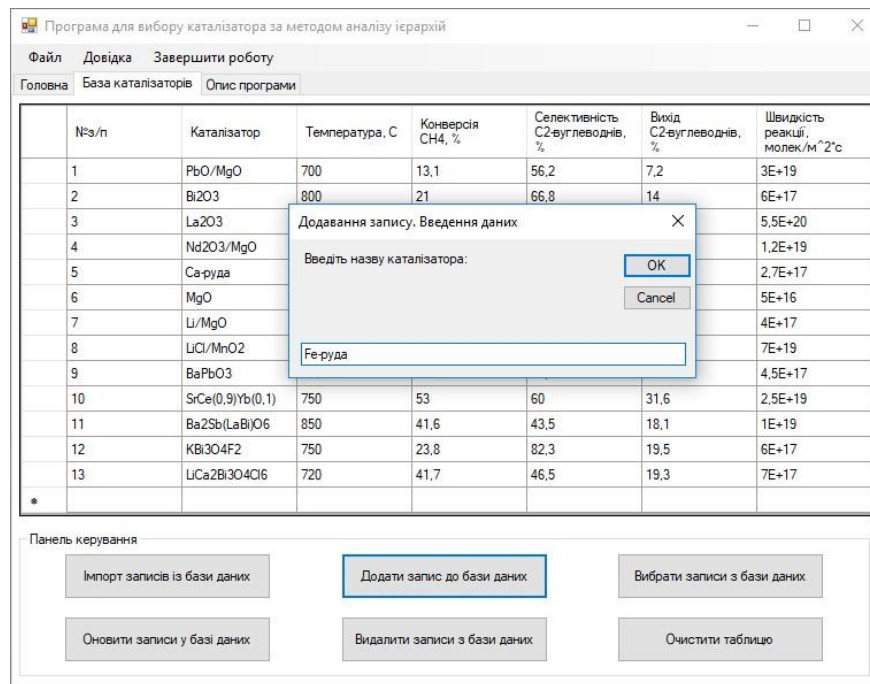


Рисунок 2.14 – Додавання запису до бази даних

Після успішного додавання запису система відобразить інформаційне повідомлення, як показано на рис. 2.15.

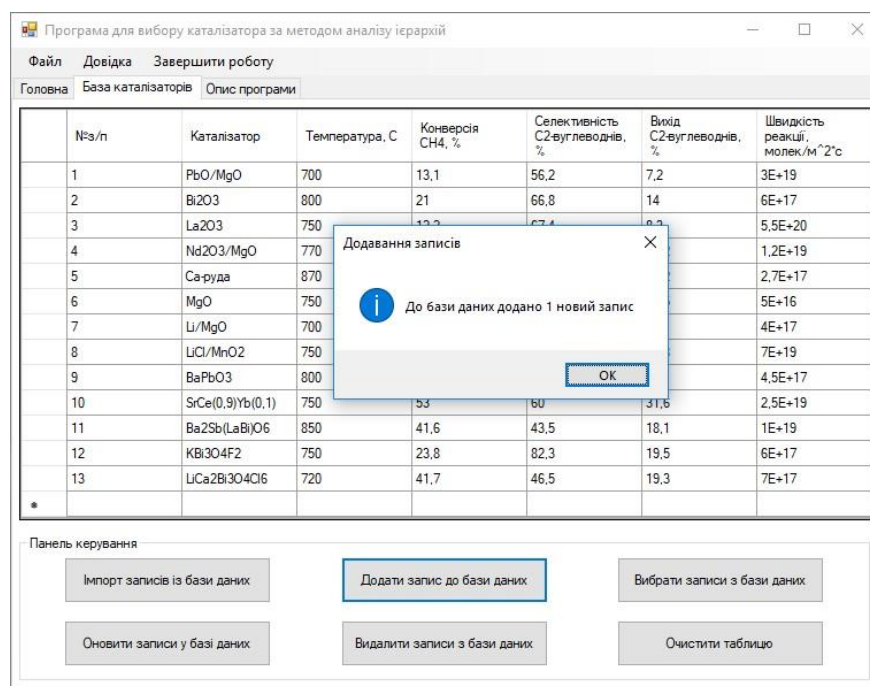


Рисунок 2.15 – Інформаційне повідомлення про успішне додавання запису

Для того, щоб запис з'явився у таблиці програми потрібно натиснути клавішу “Очистити таблицю” та знову імпортувати записи з БД. Результати виконання наведено на рис. 2.16.

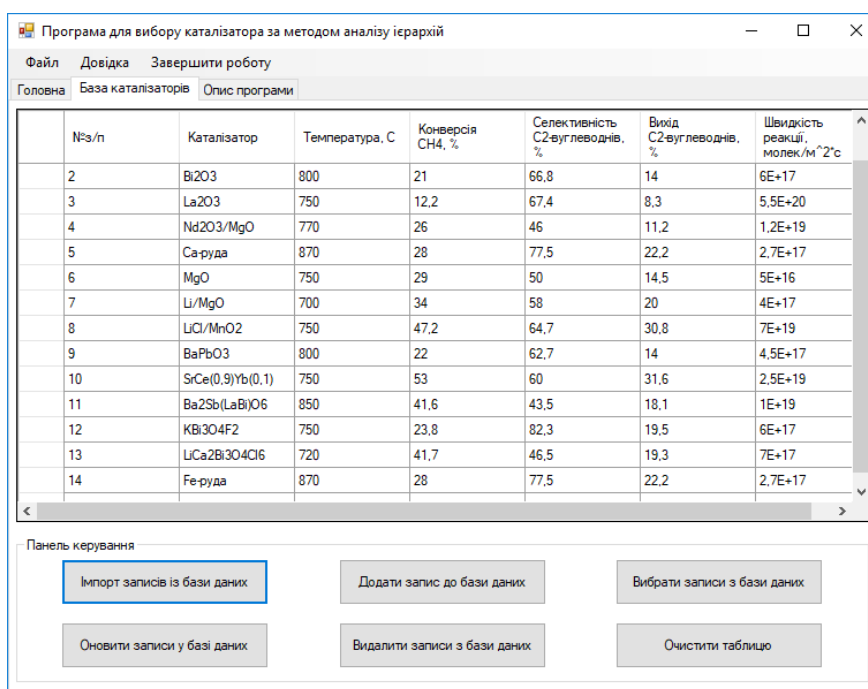


Рисунок 2.16 – База даних із доданим записом

Для видалення запису необхідно натиснути клавішу “Видалити записи з бази даних” та заповнити вікна, що впливають (рис. 2.17).

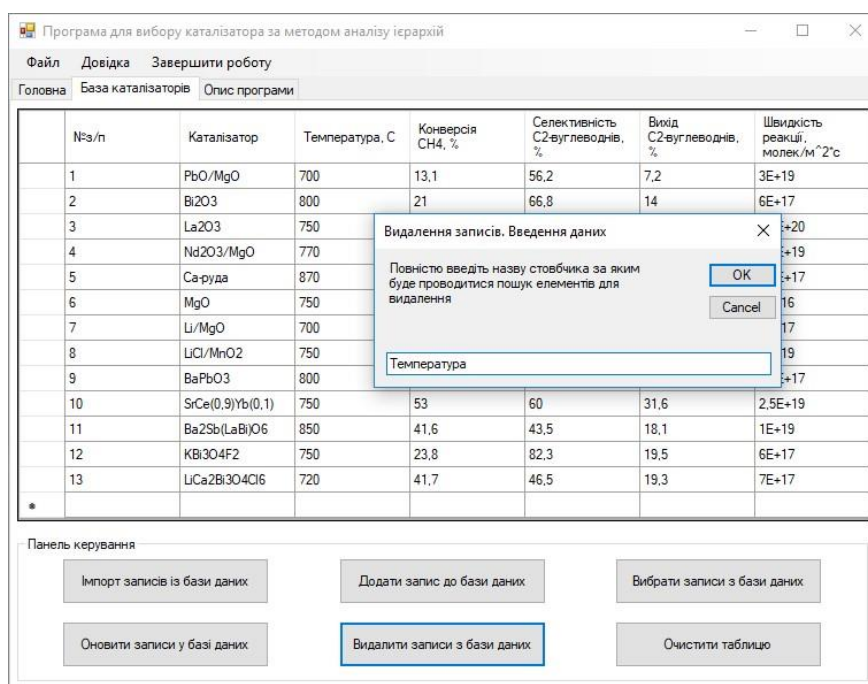


Рисунок 2.17 – Видалення запису з бази даних

Після успішного видалення запису система відобразить інформаційне повідомлення, як показано на рис. 2.18.

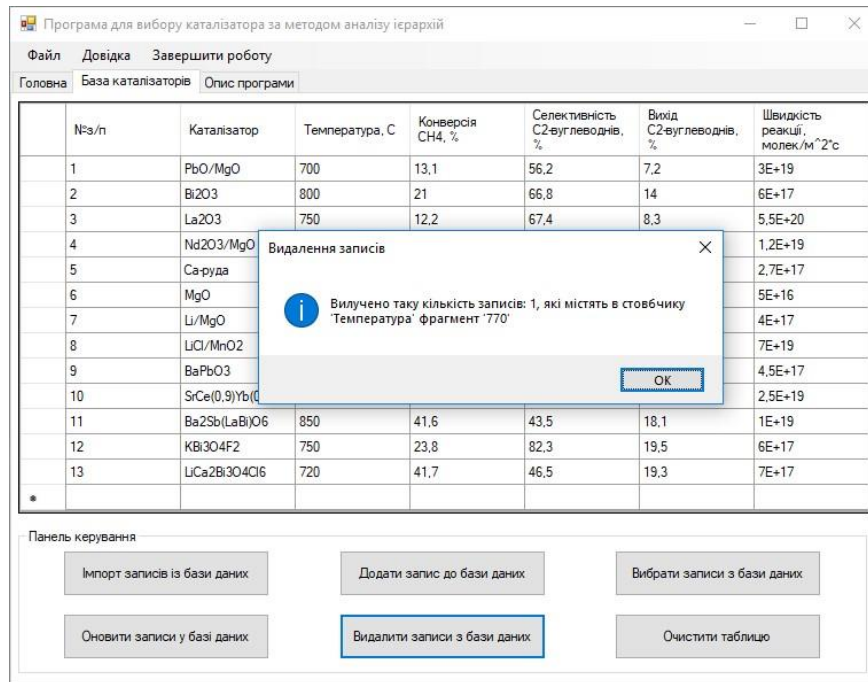


Рисунок 2.18 – Інформаційне повідомлення про успішне видалення запису

Для того, щоб запис був видалений з таблиці програми потрібно натиснути клавішу “Очистити таблицю” та знову імпортувати записи з БД. Результати виконання наведено на рис. 2.19.

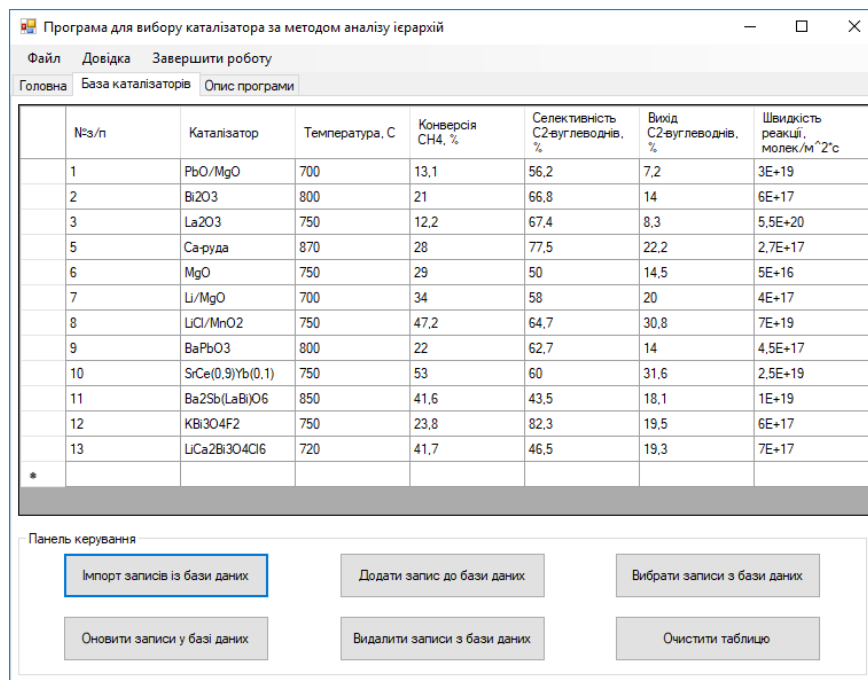


Рисунок 2.19 – База даних із видаленим записом

Для вибору записів необхідно натиснути клавішу “Вибрати записи з бази даних” та заповнити вікна, що випливають (рис. 2.20).

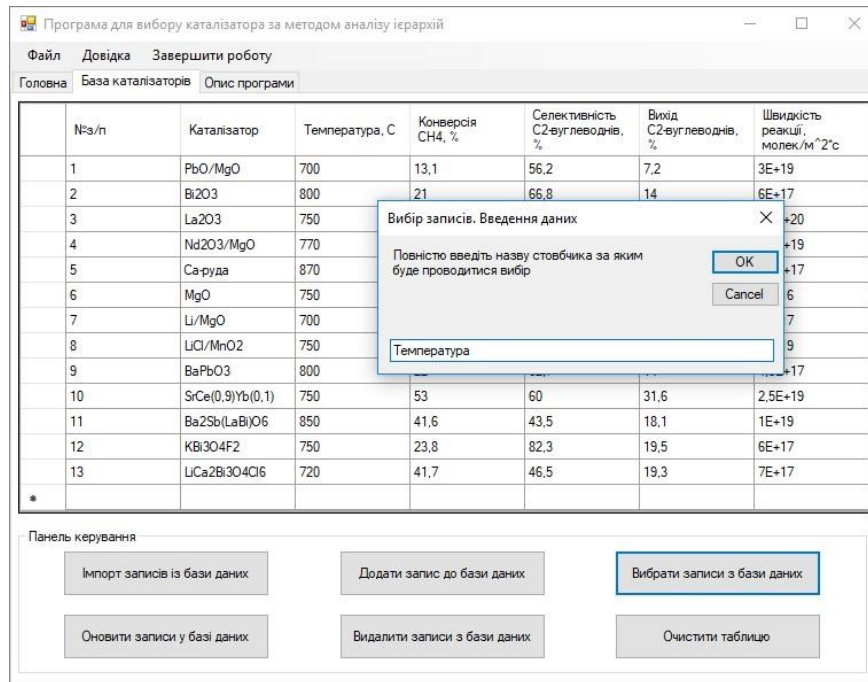


Рисунок 2.20 – Вибір записів із бази даних

Результати вибору записів за критерієм “Температура” = 750 зображені на рис. 2.21.

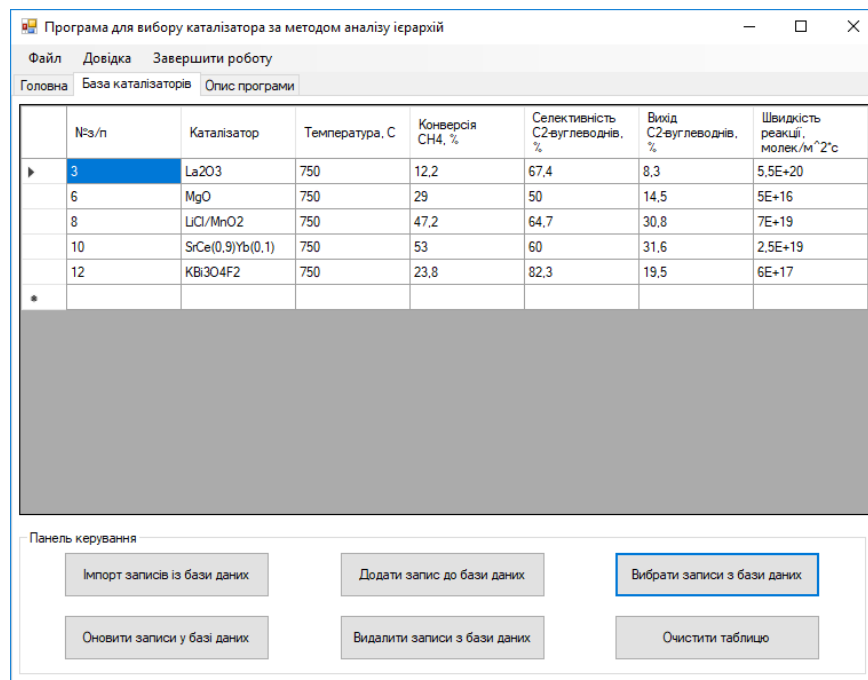


Рисунок 2.21 – База даних із вибраних записів

На вкладці “Опис програми” (рис. 2.22) розміщена інформація про призначення програми, ієрархічна структура процесу вибору каталізатора та панель керування на якій містяться керуючі клавіші “Почати роботу”, “Інструкція користувача по роботі з СУБД”, “Інструкція користувача по роботі з програмою” та “Про програму”.

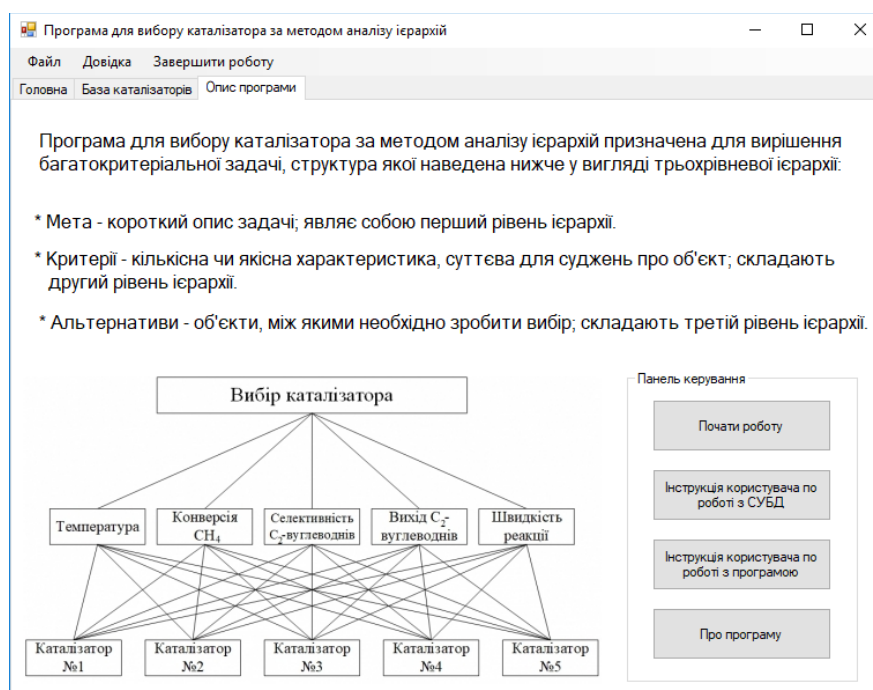


Рисунок 2.22 – Вкладка “Початкова інформація”

Натиснувши на клавішу “Про програму” користувач отримає інформаційне вікно (рис. 2.23), що містить інформацію про назву програми, її версію, розробника, наукового керівника та рік виходу програми.

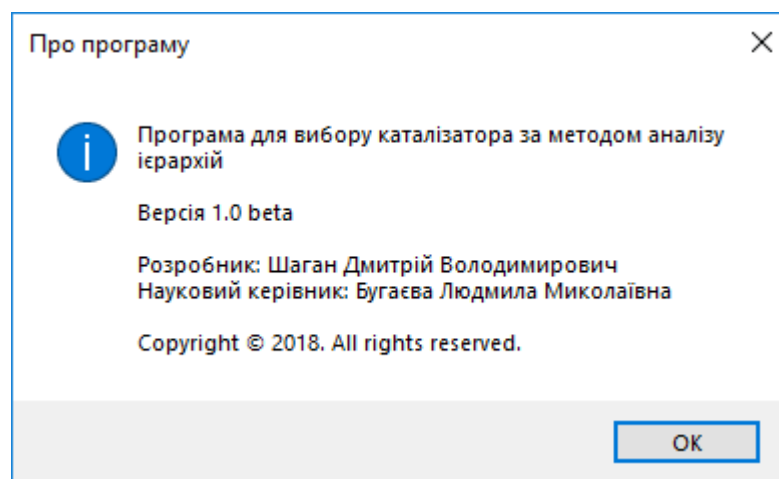


Рисунок 2.23 – Інформаційне вікно “Про програму”

Натиснувши на клавішу “Інструкція користувача по роботі з СУБД” користувач отримає інформаційне вікно (рис. 2.24), що містить алгоритм роботи з СУБД.

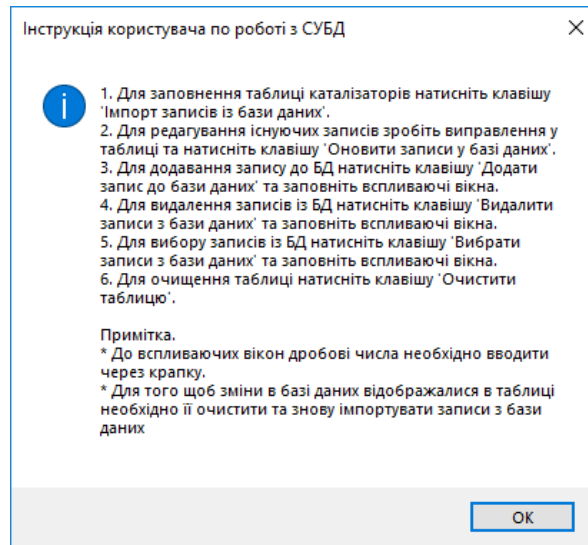


Рисунок 2.24 – Інформаційне вікно “Інструкція користувача по роботі з СУБД”

Натиснувши на клавішу “Інструкція користувача по роботі з програмою” користувач отримає інформаційне вікно (рис. 2.25), що містить алгоритм роботи з програмою.

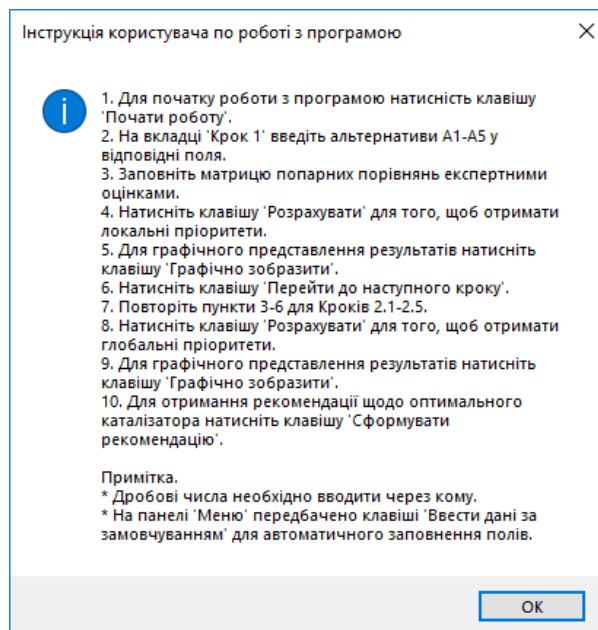


Рисунок 2.25 – Інформаційне вікно “Інструкція користувача по роботі з програмою”

Для початку роботи з програмою необхідно натиснути клавішу “Почати роботу”. У результаті буде відкрито нову вкладку “Крок 1”, яка наведена на рис. 2.26.

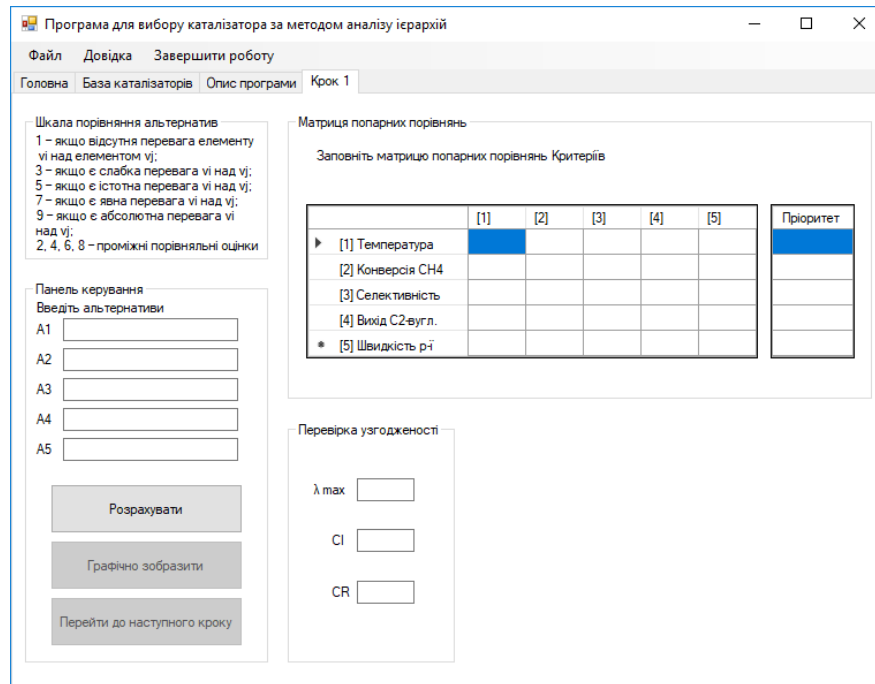


Рисунок 2.26 – Вкладка “Крок 1”

Спочатку необхідно ввести альтернативи до відповідних полів, після чого заповнити матрицю парних порівнянь використовуючи шкалу порівнянь. Також у програмі передбачено введення даних за замовчуванням, для цього слід натиснути клавіші “Меню” та “Ввести дані за замовчуванням” (рис. 2.27).

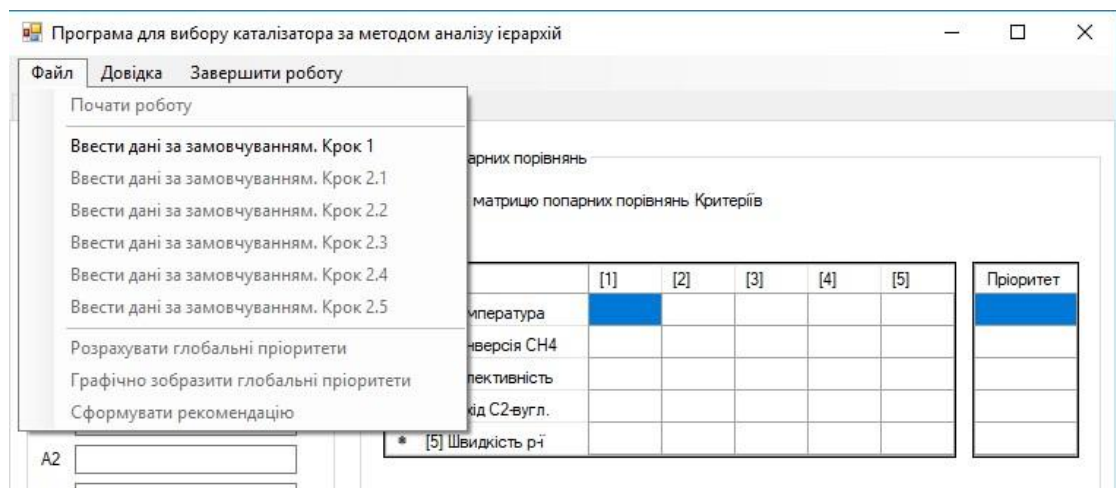


Рисунок 2.27 – Введення даних за замовчуванням

Далі слід натиснути клавішу “Розрахувати”. Внаслідок цих дій система обчислить локальні пріоритети та значення, що необхідні для перевірки, а саме: максимальне власне значення, індекс узгодженості та відношення узгодженості, а також відобразить інформаційне повідомлення щодо допустимості отриманих значень (рис. 2.28).

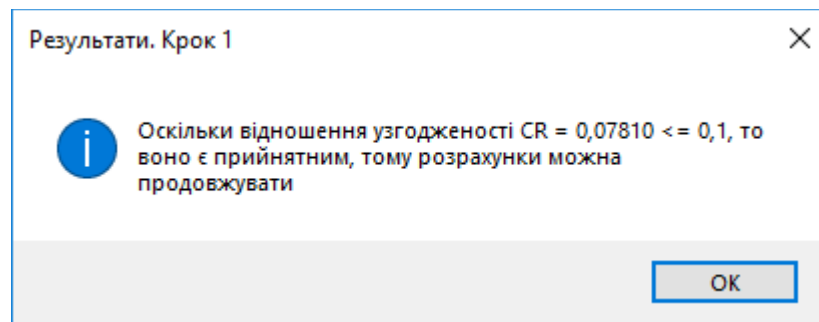


Рисунок 2.28 – Інформаційне вікно щодо допустимості результатів

Для того щоб побудувати діаграму локальних пріоритетів необхідно натиснути клавішу “Графічно зобразити”.

У результаті вікно програми виглядатиме як показано на рис. 2.29.

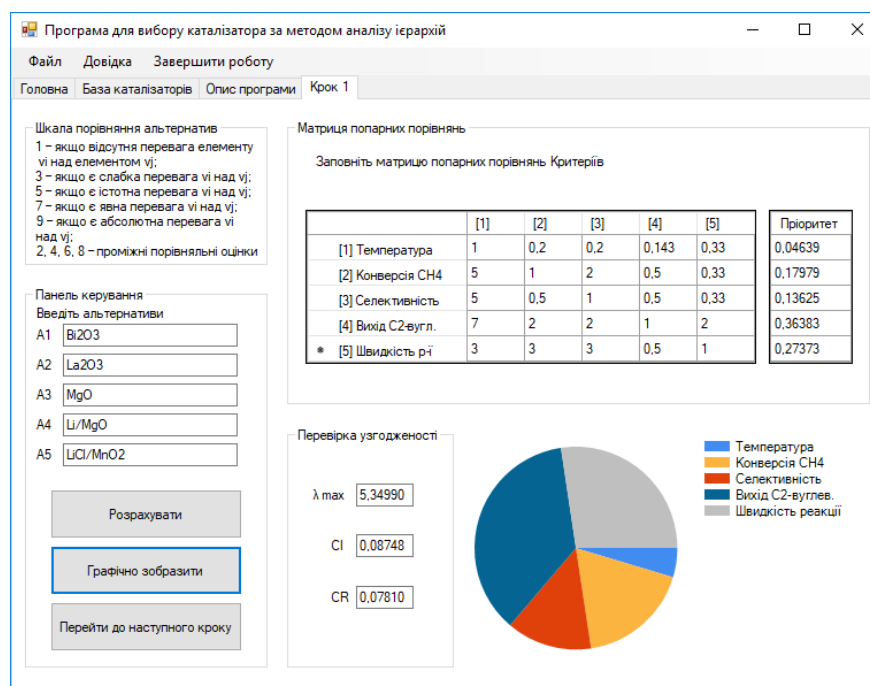


Рисунок 2.29 – Вікно обчислення локальних пріоритетів критеріїв

Натиснувши клавішу “Перейти до наступного кроку” відкриється нова вкладка. Повторимо дії, що описані вище, для кроків 2.1 – 2.5. Результати обчислень наведені на рис. 2.30 – 2.34.

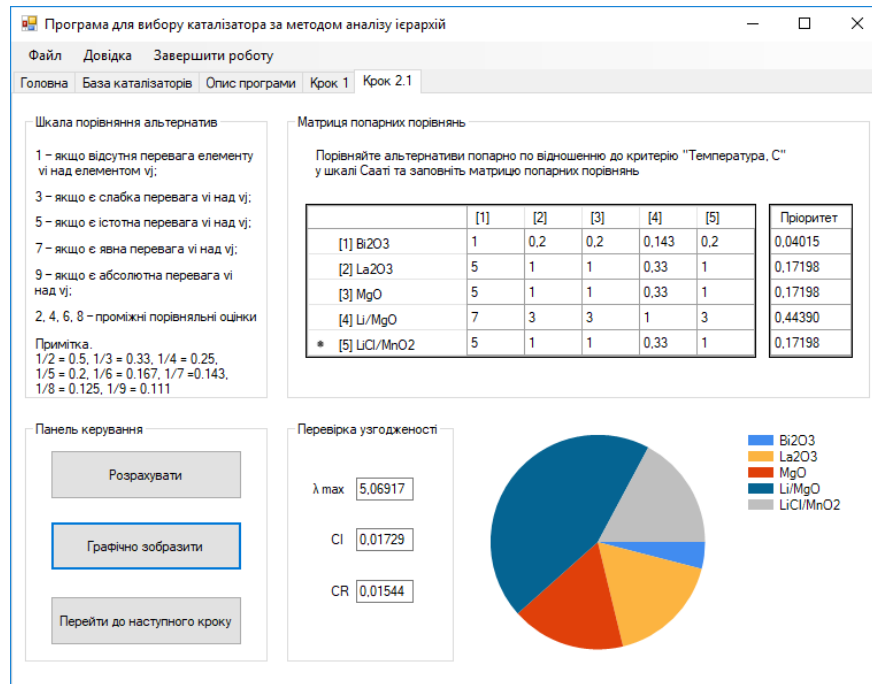


Рисунок 2.30 – Вікно обчислення локальних пріоритетів альтернатив за критерієм “Температура”

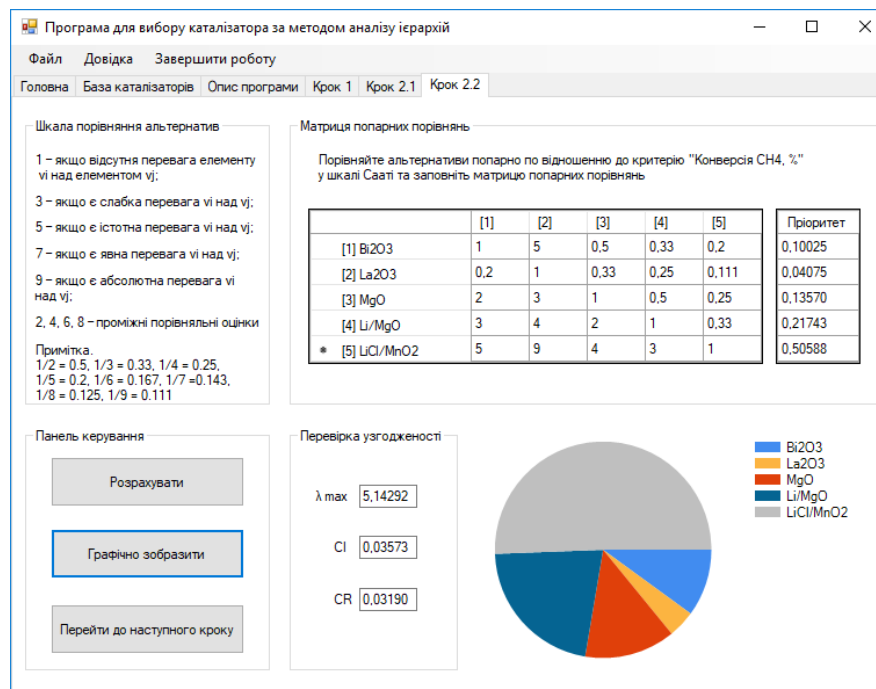


Рисунок 2.31 – Вікно обчислення локальних пріоритетів альтернатив за критерієм “Конверсія CH₄”

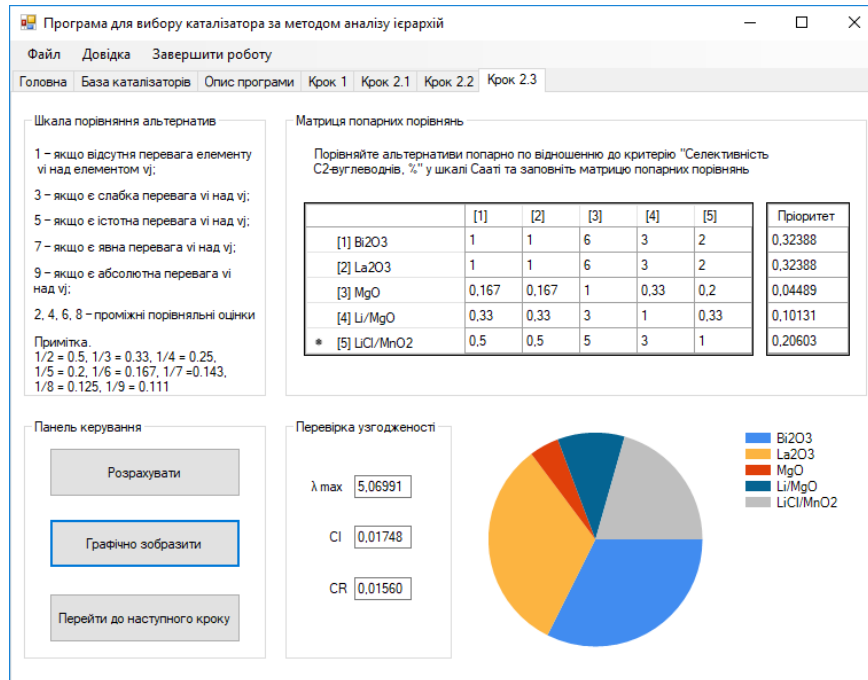


Рисунок 2.32 – Вікно обчислення локальних пріоритетів альтернатив за критерієм “Селективність C2-вуглеводнів”

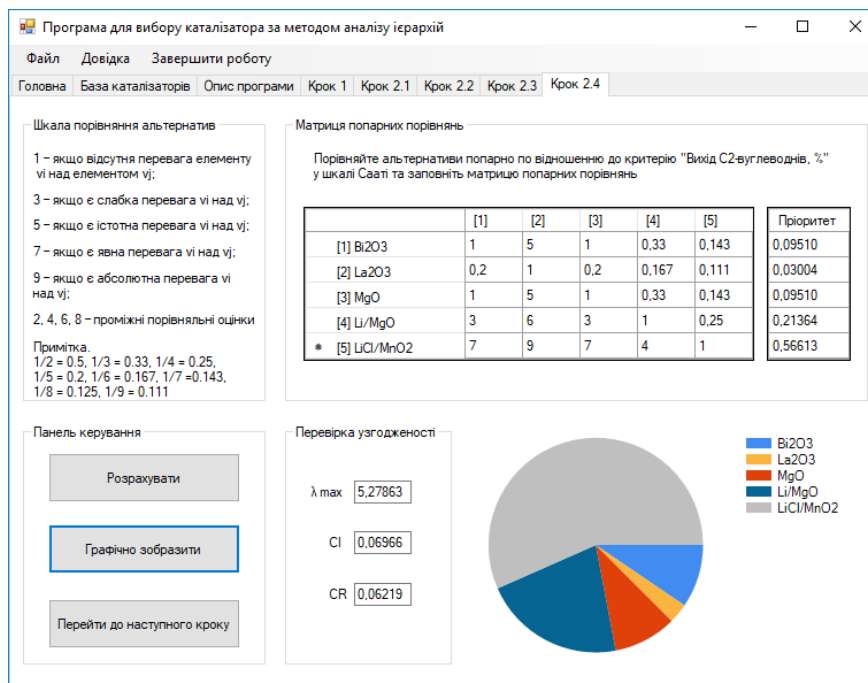


Рисунок 2.33 – Вікно обчислення локальних пріоритетів альтернатив за критерієм “Вихід C2-вуглеводнів”

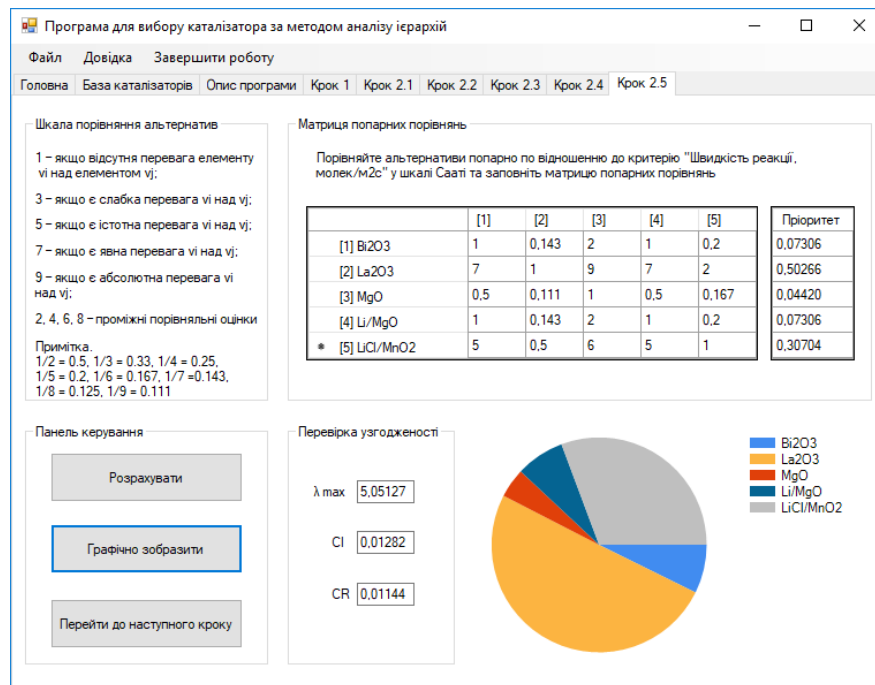


Рисунок 2.34 – Вікно обчислення локальних пріоритетів альтернатив за критерієм “Швидкість реакції”

Останнім етапом є обчислення глобальних пріоритетів каталізаторів. Для отримання рекомендації щодо вибору оптимального каталізатора слід послідовно натиснути клавіші “Розрахувати”, “Графічно зобразити” та “Сформувані рекомендацію”. Результати наведені на рис. 2.35.

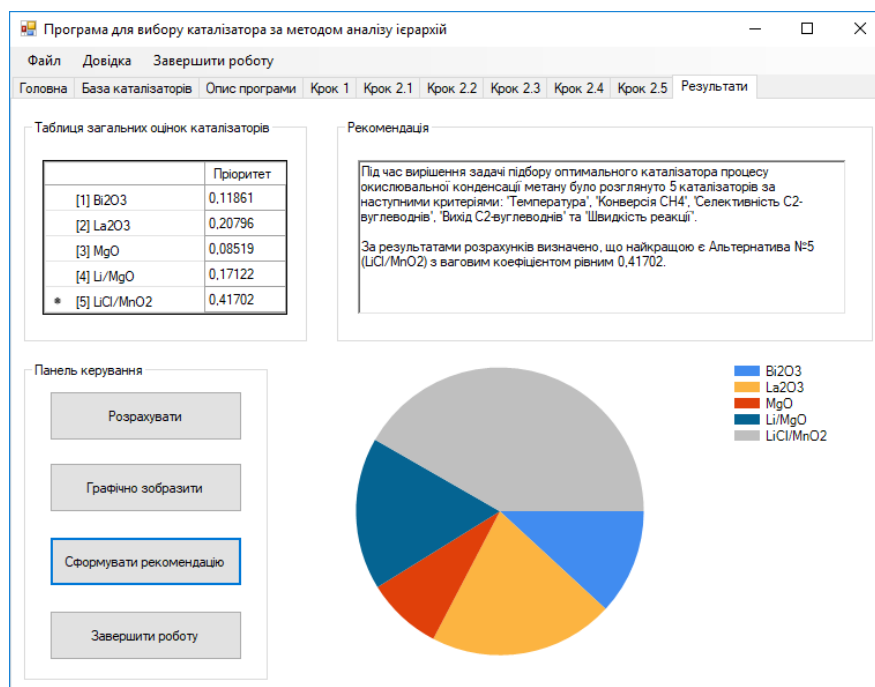


Рисунок 2.35 – Вікно глобальних пріоритетів

Згідно з рис. 2.35, за результатами роботи програми було визначено, що найкращою є Альтернатива №5 з ваговим коефіцієнтом рівним 0.41702, а саме каталізатор LiCl/MnO₂.

2.3 Видобування знань із даних та можливість побудови інтелектуальних систем на їх основі

Data Mining – це процес виявлення у необроблених даних раніше невідомих нетривіальних, практично корисних і доступних інтерпретацій знань, необхідних для прийняття рішень у різних сферах діяльності [37].

2.3.1 Завдання та методи видобування знань

Data Mining застосовується при вирішенні наступних завдань [38]:

1. Класифікація (Classification) – виявлення ознак, які характеризують групи об'єктів досліджуваного набору даних – класи; за цими ознаками новий об'єкт можна віднести до заздалегідь відомого класу.
2. Кластеризація (Clustering) – розподіл об'єктів за певними ознаками на групи, які раніше не були відомими.
3. Асоціація (Associations) – визначення закономірності між пов'язаними подіями у наборі даних.
4. Послідовність (Sequence) – знаходження часових закономірностей між транзакціями. Завдання послідовності подібне до асоціації, але її метою є встановлення закономірностей між подіями, пов'язаними за часом.
5. Прогнозування (Forecasting) – оцінювання майбутніх значень показників на основі особливостей історичних даних.
6. Аналіз відхилень (Deviation Detection) – виявлення й аналіз даних, що найбільше відрізняються від загальної чисельності даних, виявлення нехарактерних шаблонів.
7. Оцінювання (Estimation) – прогнозування безперервних значень ознак.
8. Аналіз зв'язків (Link Analysis) – знаходження залежностей у наборі даних.

9. Візуалізація (Visualization, Graph Mining) – створення графічного образу аналізованих даних.

10. Підбивання підсумків (Summarization) – описування конкретних груп об'єктів за допомогою аналізованого набору даних.

Для вирішення вищеописаних завдань застосовуються різноманітні методи, які можна об'єднати у три групи:

1) Технологічні методи:

- безпосереднє використання даних, або збереження даних (кластерний аналіз, метод найближчого сусіда);
- виявлення і використання формалізованих закономірностей, або дистиляція шаблонів (логічні методи, методи візуалізації, методи крос-табуляції, методи, що засновані на рівняннях).

2) Статистичні методи:

- описовий аналіз і опис вихідних даних;
- аналіз зв'язків (кореляційний і регресійний аналіз, факторний аналіз, дисперсійний аналіз);
- багатовимірний статистичний аналіз (компонентний аналіз, дискримінантний аналіз, багатовимірний регресійний аналіз, канонічні кореляції та ін.);
- аналіз тимчасових рядів (динамічні моделі і прогнозування).

3) Методи, що базуються на теорії штучного інтелекту (кібернетичні методи):

- штучні нейронні мережі (розпізнавання, кластеризація, прогноз);
- еволюційне програмування;
- генетичні алгоритми (оптимізація);
- асоціативний алгоритм;
- нечітка логіка;
- дерева рішень;
- системи обробки експертних знань.

2.3.2 Дерева рішень

Дерева рішень є одним із найпопулярніших підходів до розв'язання задач Data Mining [39]. Вони створюють ієрархічну структуру правил, класифікованих за схемою « якщо ... то ... » (if-then), яка має вигляд дерева. Для ухвалення рішення про те, до якого класу варто віднести деякий об'єкт (ситуацію, потрібно відповісти на запитання, що містяться у вузлах цього дерева, починаючи з його кореня. Запитання можуть бути, наприклад, такі: «Значення параметра a більше за x ?». Якщо відповідь ствердна, відбувається перехід до правого вузла наступного рівня, якщо заперечна – до лівого вузла. Далі знову ставиться запитання, пов'язане з відповідним вузлом.

Популярність цього підходу зумовлюється наочністю та зрозумілістю. Але дерева рішень принципово не здатні знаходити «кращі» (найбільш повні і точні) правила в даних. Вони реалізують принцип послідовного перегляду ознак і збирають фактично уламки наявних закономірностей, створюючи лише ілюзію логічного висновку.

Проте більшість систем діють саме за цим методом. До таких належать, наприклад, See5/C5.0 (RuleQuest, Австралія), Clementine (Integral Solutions, Великобританія), SIPINA (University of Lyon, Франція), IDIS (Information Discovery, США), KnowledgeSeeker (ANGOSS, Канада).

Одним з найбільш ранніх алгоритмів навчання дерев рішень є алгоритм ID3, який використовує рекурсивне розбиття підмножин у вузлах дерева за одним із обраних атрибутів. Починає роботу з кореня дерева, в якому містяться всі приклади навчальної множини. Для поділу в ньому вибирається один з атрибутів, і для кожного прийнятого ним значення будується гілка, і створюється дочірній вузол, до якого розподіляються усі записи, що містять його. Саме на цьому алгоритмі базується програма See5, яка і буде використана для вибору оптимального каталізатора.

До програми See5 було закладено ідею посилення рішення (boosting), яка полягає в конструюванні не одного, а відразу декількох дерев рішень

[40]. При цьому головна вимога до таких дерев рішень полягає у тому, щоб вони якомога менше дублювали один одного [41].

На першому кроці конструюється початкове дерево рішень. Класифікатор, побудований на основі початкового дерева, може видавати помилки на деяких об'єктах.

На другому кроці при конструюванні наступного дерева робиться спроба уникнути раніше зроблених помилок. Наслідком такої спроби вважається істотна відмінність другого дерева від початкового. Отримане дерево також буде призводити до помилкових рішень, але вже на інших об'єктах. На наступному кроці роботи алгоритму чергове дерево будується з урахуванням помилок усіх попередніх дерев рішень.

2.3.3 Застосування засобів інтелектуальної обробки даних для вибору каталізатора

Призначенням підсистеми складеної у середовищі See5 є вибір каталізатора реакції окислювальної конденсації метану, який найкраще підходить заданим параметрам процесу.

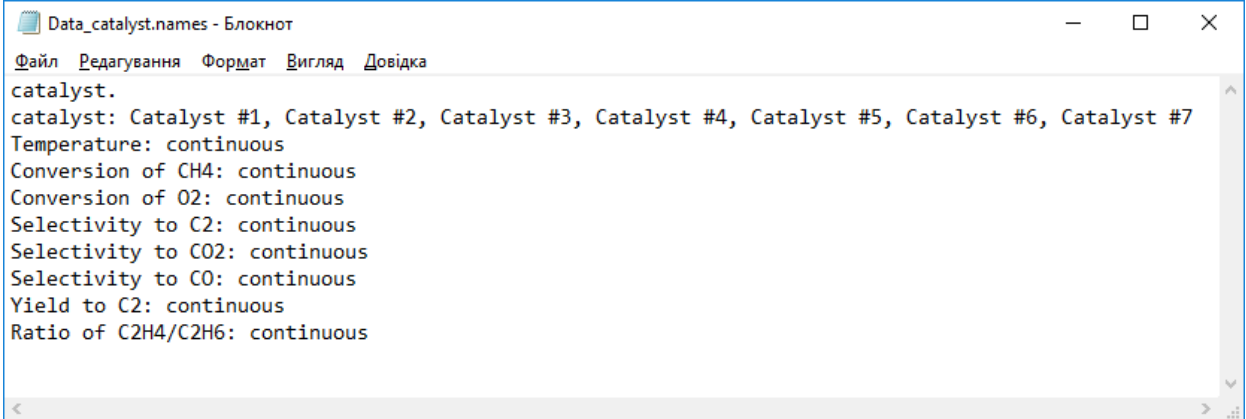
У якості вихідних даних використовуються роботи [19,42], де наведені експериментально отримані значення параметрів процесу ОКМ при застосування різних каталізаторів. Для зручності сприйняття інформації, каталізатори були зашифровані, як показано в табл. 2.11.

Таблиця 2.11 – Вихідні дані

Каталізатор	Назва у програмі
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2$	Catalyst #1
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2(Ag/SiO_2)$	Catalyst #2
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2 + Ag/SiO_2$	Catalyst #3
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2(Ag/SiO_2); V = 0, d = 10$	Catalyst #4
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2(Ag/Al_2O_3); V = 0, d = 30$	Catalyst #5
$Mn - Na_2WO_4/SiO_2(Ag/Al_2O_3); V = 2, d = 50$	Catalyst #6
$Mn_2O_3 - Na_2WO_4/SiO_2$	Catalyst #7

Програма See5 працює за наступним алгоритмом.

1. Спочатку необхідно підготувати файл імен змінних під назвою `Data_catalyst.names`, де наводяться назви ознак, що використовуються та класів (рис. 2.36).



```

Data_catalyst.names - Блокнот
Файл  Редагування  Формат  Вигляд  Довідка
catalyst.
catalyst: Catalyst #1, Catalyst #2, Catalyst #3, Catalyst #4, Catalyst #5, Catalyst #6, Catalyst #7
Temperature: continuous
Conversion of CH4: continuous
Conversion of O2: continuous
Selectivity to C2: continuous
Selectivity to CO2: continuous
Selectivity to CO: continuous
Yield to C2: continuous
Ratio of C2H4/C2H6: continuous
  
```

Рисунок 2.36 – Файл імен змінних

З рис. 2.36 видно, що цільова ознака Catalyst (Каталізатор) приймає 7 можливих значень: Catalyst #1 ... Catalyst #7 (Каталізатор №1 ... Каталізатор №7). Ознаки Temperature (Температура), Conversion of CH₄ (Ступінь перетворення CH₄), Conversion of O₂ (Ступінь перетворення O₂), Selectivity to C₂ (Селективність по C₂), Selectivity to CO₂ (Селективність по CO₂), Selectivity to CO (Селективність по CO), Yield to C₂ (Вихід по C₂) та Ratio of C₂H₄/C₂H₆ (Відношення C₂H₄ до C₂H₆) є кількісними, типу continuous.

2. Другим файлом, який необхідно скласти, є файл даних під іменем `Data_catalyst.data`, який зображено на рис. 2.37. Повний лістинг файлу наведено у додатку В.

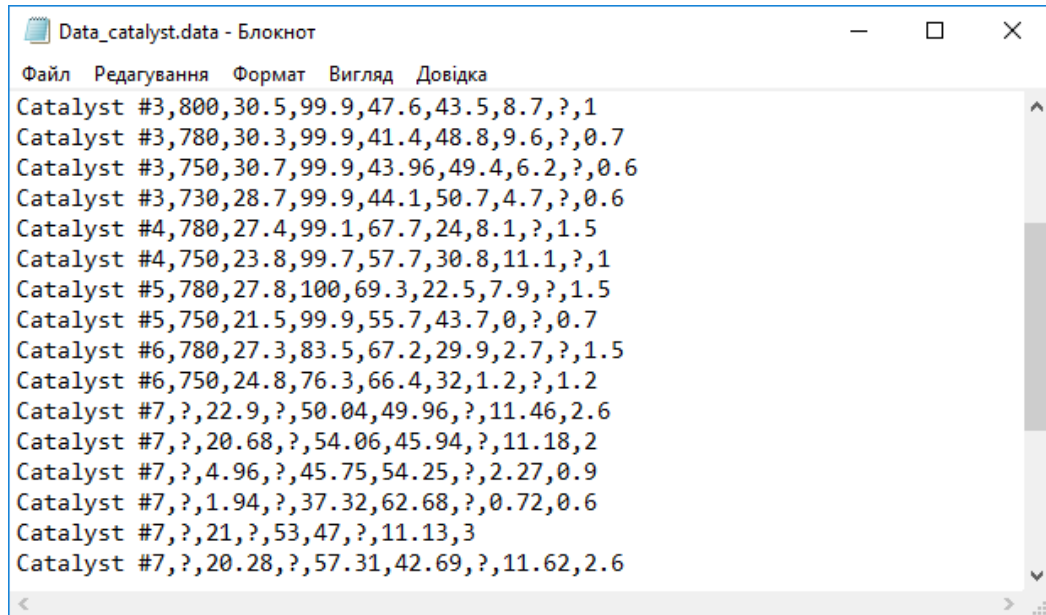


Рисунок 2.37 – Файл даних

Кожному об'єкту в файлі даних відповідає власний рядок. Якщо значення цільової змінної знаходиться вгорі файлу імен змінних, рядок починається зі значення цієї цільової змінної. Потім через кому йдуть значення всіх інших ознак. Невідомі значення змінних кодуються знаком «?».

3. Після того, як файли були створені, потрібно запустити програму See5 та завантажити підготовлений файл даних до системи (рис. 2.38).

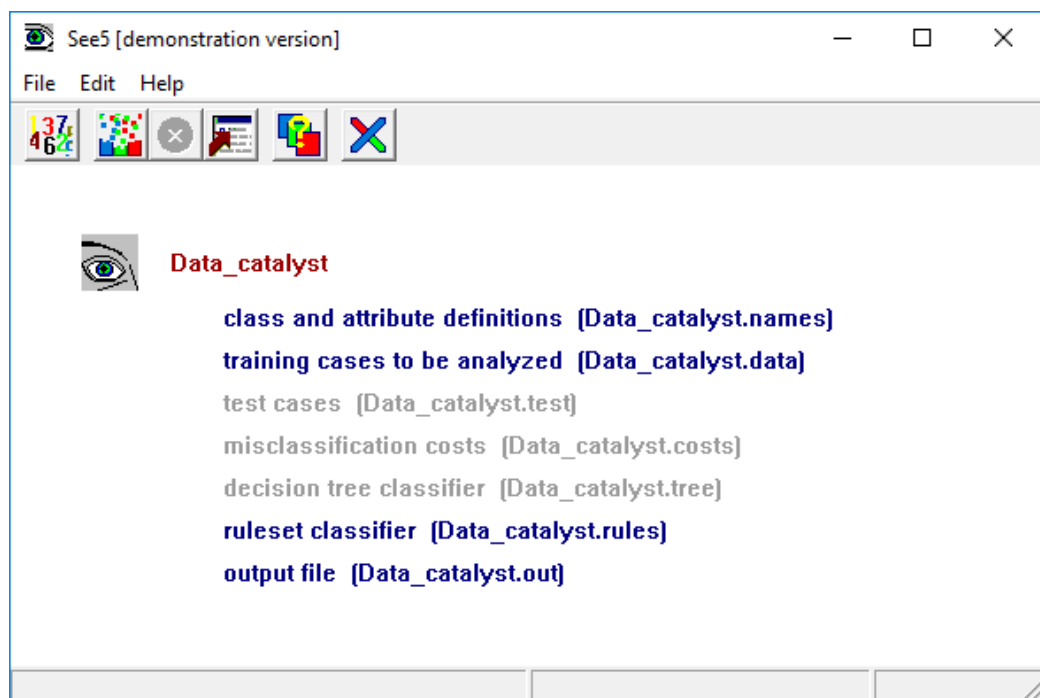


Рисунок 2.38 – Головне вікно програми See5

Далі слід натиснути на клавішу Construct Classifier для того, щоб задати параметри алгоритму конструювання класифікатора. При цьому з'явиться вікно діалогу, яке наведено на рис. 2.39.

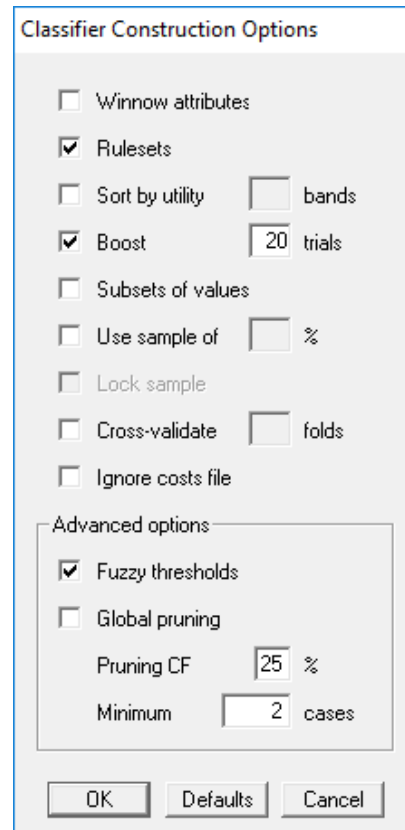


Рисунок 2.39 – Діалогове вікно для вказання параметрів алгоритму

Як видно з рис. 2.39, було застосовано наступні параметри алгоритму:

- Rulesets – побудова дерев рішень у вигляді набору правил, що полегшує його сприйняття людиною, оскільки у ряді випадків побудоване дерево може виявитися складним і заплутаним;
- Boost – посилення рішення, шляхом одночасного конструювання кількох дерев рішень. У даному випадку встановлена їх кількість дорівнює 20;
- Fuzzy thresholds – вводить нечіткі (м'які) пороги, що призводить до підвищення стійкості отриманих результатів до можливих відхилень значень ознак.

4. Після запуску алгоритму програма відобразить вікно правил, як показано на рис. 2.40. Лістинг правил наведений у додатку Г.



```

Results for Data_catalyst
File Edit

See5 [Release 2.10]   Fri May 04 02:30:48 2018

Options:
  Rule-based classifiers
  20 boosting trials
  Do not use global pruning

Class specified by attribute `catalyst'

Read 34 cases (9 attributes) from Data_catalyst.data

----- Trial 0: -----

Rules:

Rule 0/1: (6/2, lift 5.3)
  Conversion of CH4 <= 35.9
  Selectivity to C2 > 50.04
  Selectivity to CO > 7.9
  -> class Catalyst #1 [0.625]

Rule 0/2: (18/14, lift 2.1)
  Conversion of CH4 > 21
  -> class Catalyst #2 [0.250]

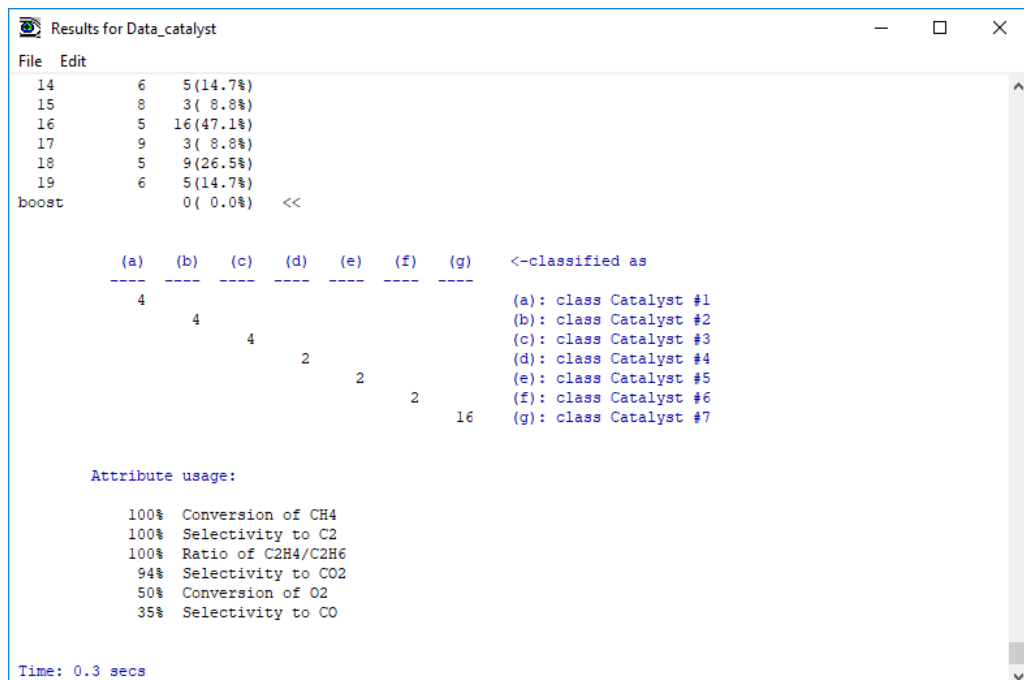
Rule 0/3: (4, lift 7.1)
  Conversion of CH4 > 27.8
  Selectivity to C2 <= 50.04
  -> class Catalyst #3 [0.833]

```

Рисунок 2.40 – Вікно дерева рішень у вигляді набору правил

Як видно з рис. 2.40, завантажений файл містить 34 об’єкти, кожен з яких описаний дев’ятьма ознаками, а класифікуючою є змінна “catalyst”.

Результати побудови правил наведені на рис. 2.41.



```

Results for Data_catalyst
File Edit

14      6      5(14.7%)
15      8      3( 8.8%)
16      5     16(47.1%)
17      9      3( 8.8%)
18      5      9(26.5%)
19      6      5(14.7%)
boost   0( 0.0%) <<

(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g) <-classified as
-----
4
  4
    4
      2
        2
          2
            16
              (a): class Catalyst #1
              (b): class Catalyst #2
              (c): class Catalyst #3
              (d): class Catalyst #4
              (e): class Catalyst #5
              (f): class Catalyst #6
              (g): class Catalyst #7

Attribute usage:

100% Conversion of CH4
100% Selectivity to C2
100% Ratio of C2H4/C2H6
94%  Selectivity to CO2
50%  Conversion of O2
35%  Selectivity to CO

Time: 0.3 secs

```

Рисунок 2.41 – Вікно результатів побудови правил

На рис. 2.41 можна бачити, що дерева рішень проводять класифікацію даних безпомилково. Для досягнення такого результату знадобилося використання 135 правил. Встановлено, що найбільш ваговими атрибутами є ступінь перетворення CH_4 (100%), селективність по C_2 (100%), відношення C_2H_4 до C_2H_6 (100%) та селективність по CO_2 (94%).

5. Після того, як було побудовано дерево рішень, що є задовільним, запусимо систему у режимі консультацій, натиснувши Use Classifier. Після чого на екран будуть з'являтися діалогові вікна, що впливають, до яких необхідно вводити значення ознак, як показано на рис. 2.42.

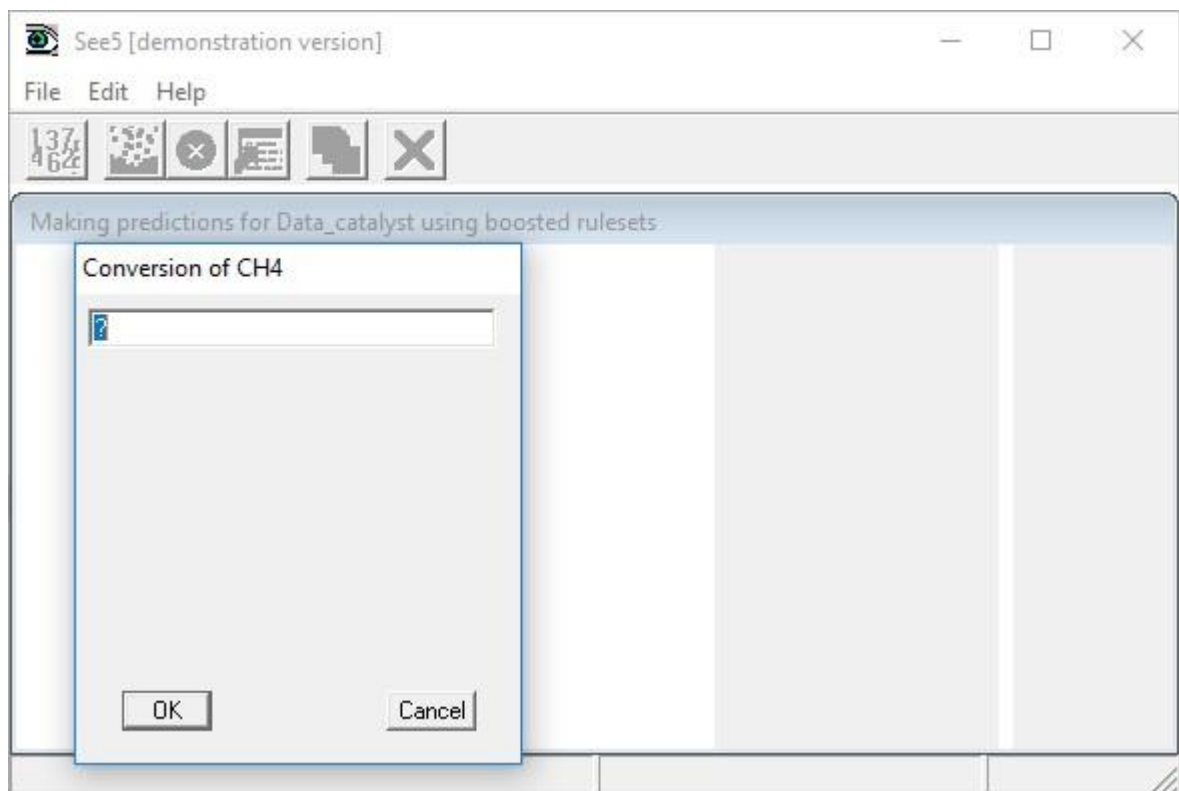


Рисунок 2.42 – Діалогове вікно введення значення ознаки

Введемо наступні параметри: Conversion of CH_4 = 25; Selectivity to C_2 = 52; Selectivity to CO = ?; Conversion of O_2 = 99; Selectivity to CO_2 = 37; Ratio of $\text{C}_2\text{H}_4/\text{C}_2\text{H}_6$ = 1.5. Задавши всі значення ознак отримуємо вікно результатів (рис. 2.43).

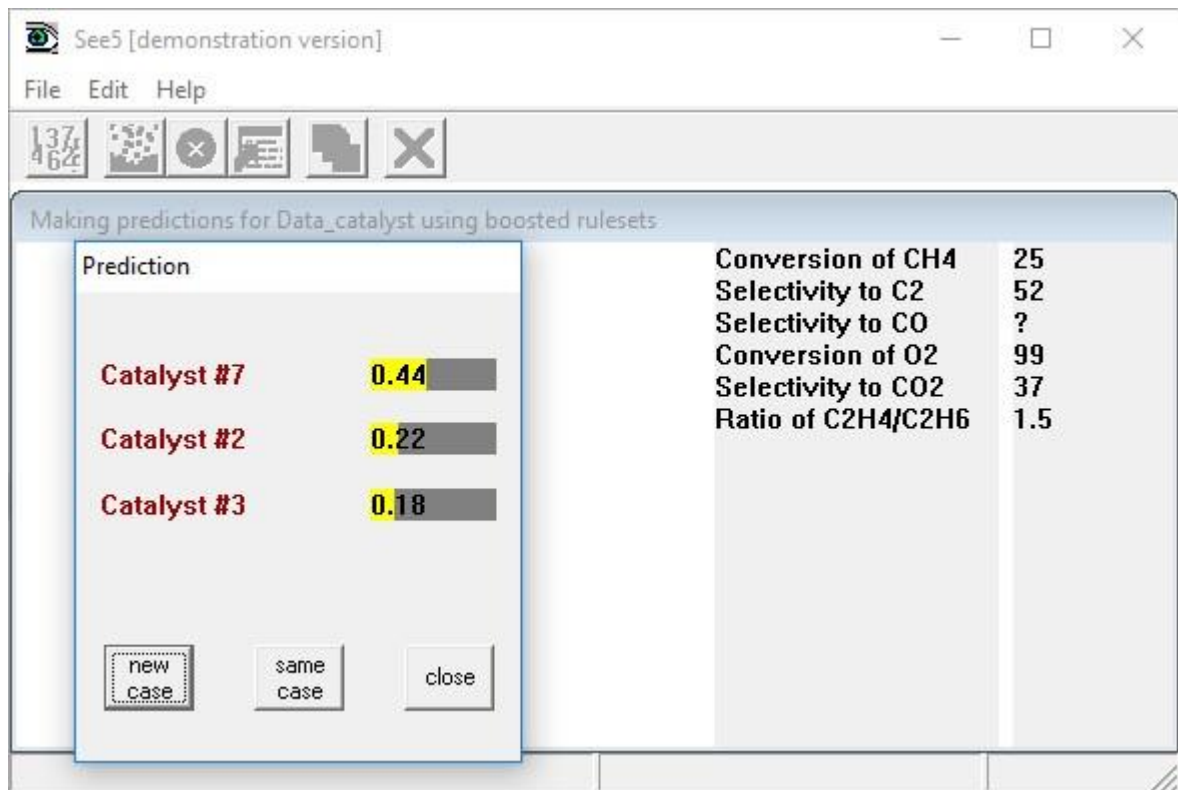


Рисунок 2.43 – Результати класифікації

З рис. 2.43 видно, що при заданих параметрах, з коефіцієнтом впевненості рівним 0.44 або 44%, оптимальним буде каталізатор під іменем “Catalyst #7”.

2.4 Висновки за розділом

У даному розділі було представлено розробку інтелектуальної системи підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора, який відображає основні задачі та результати магістерської дисертації. Рішення запропоновані інтелектуальними компонентами СППР надалі використовуються при моделюванні схеми ОКМ. Розроблене програмне забезпечення може бути корисним на етапах проектування та впровадження відповідного виробництва, а також застосовуватися операторами-технологами під час протікання виробничого процесу.

3 ВИБІР ВАРІАНТУ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Після вирішення задачі вибору оптимального каталізатора, у СППР користувачеві пропонується провести комп'ютерне моделювання процесу ОКМ у середовищі ChemCad та обрати найкращий варіант технологічної схеми.

3.1 Середовище ChemCad для комп'ютерного моделювання ОКМ

ChemCad – ефективний інструмент для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів при розробці, модернізації та оптимізації хімічних, нафтохімічних і нафтопереробних виробництв. Цей пакет програм призначений для моделювання та розрахунку технологічних схем з рециклічними потоками органічних і неорганічних речовин і безперервних сумішей (у разі нафтових фракцій), а також енергетичних потоків.

ChemCad дозволяє створювати, аналізувати і оптимізувати різні варіанти технологічного оформлення виробничих процесів, оцінювати їх ефективність і вибирати найкращий з них.

Комплекс досліджень з використанням ChemCad дає можливість домогтися задовільного збігу результатів розрахунків з даними промислових експериментів, що дозволяє вирішувати завдання автоматичного управління процесами і підвищити ефективність діючих виробництв, визначити оптимальні режимні і конструкційні параметри процесів в окремих апаратах з позиції всього виробництва в цілому.

3.2 Налаштування середовища ChemCad

На початку роботи у моделюючій програмі ChemCad 6.3.1 її потрібно налаштувати відповідно до своїх потреб. Для цього необхідно виконати наступну послідовність кроків:

- 1) Створити новий файл. Для цього запускаємо програму ChemCad та у рядку меню натискаємо File → New (або Ctrl+N), після чого файл буде створений. Для його збереження у рядку меню натискаємо File → Save As. У вікні що з'явилося вводимо ім'я файлу – OCM_flowsheet.csb та натискаємо клавішу ОК.
- 2) Задати технічні розмірності. Для цього у рядку меню натискаємо Format → Engineering Units [43]. У спливаючому вікні обираємо розмірності одиниць із системи СІ (рис. 3.1).

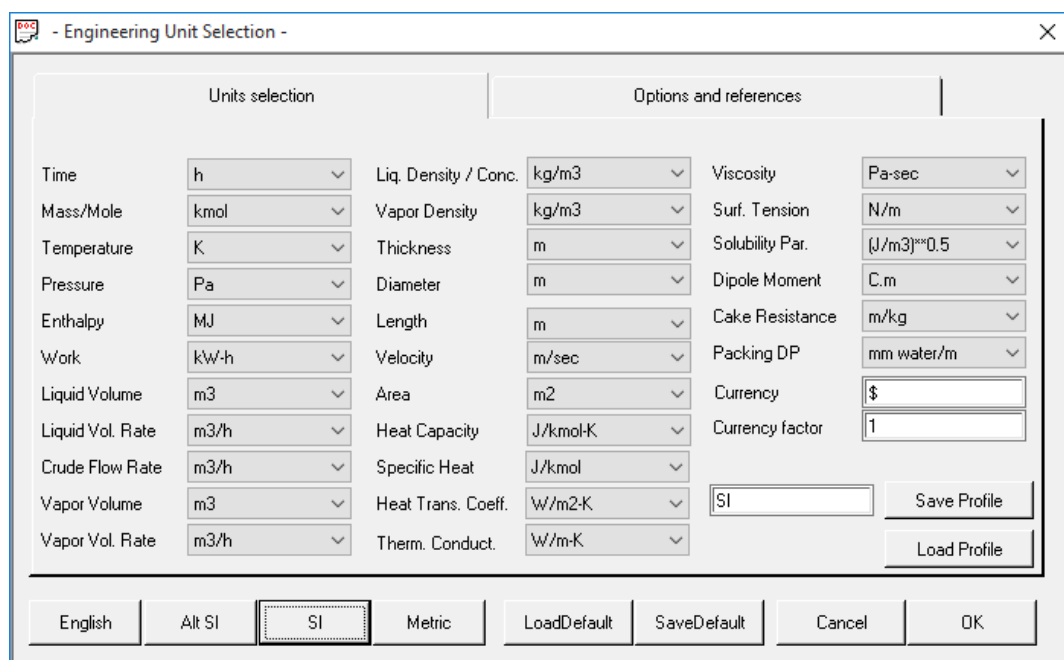


Рисунок 3.1 – Вікно вибору розмірності одиниць

- 3) Обрати компоненти (речовини), що використовуються у схемі. Усі компоненти програми містяться у банку даних, доступ до якого можливий наступним чином: у рядку меню натискаємо Thermophysical → Select Components [44]. Заносимо до нашого списку компоненти, що використовуватимуться при моделюванні, а саме: водень (Hydrogen), метан (Methane), етан (Ethane), етилен (Ethylene), вуглекислий газ (Carbone Dioxide), кисень (Oxygen) та вода (Water). Вікно компонентів зображене на рис. 3.2.

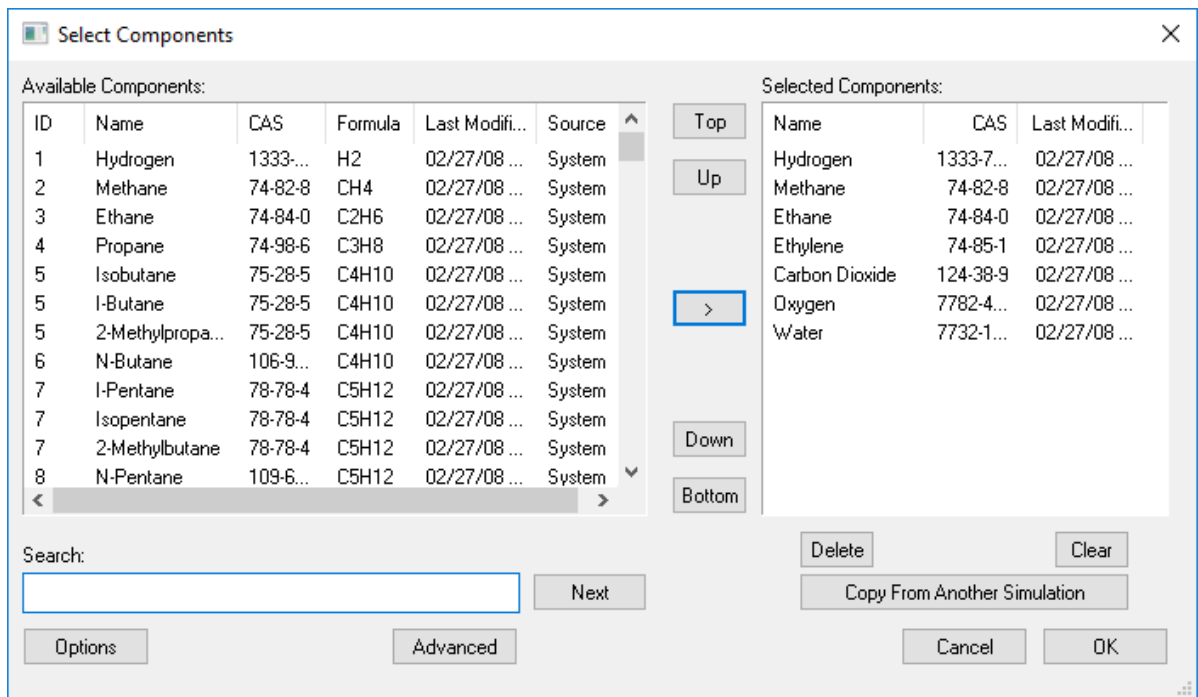


Рисунок 3.2 – Вікно компонентів

4) Обрати апарати для технологічної схеми. У програмі ChemCad присутня велика бібліотека апаратів, що розташовується, як правило, праворуч від робочого поля (рис. 3.3).

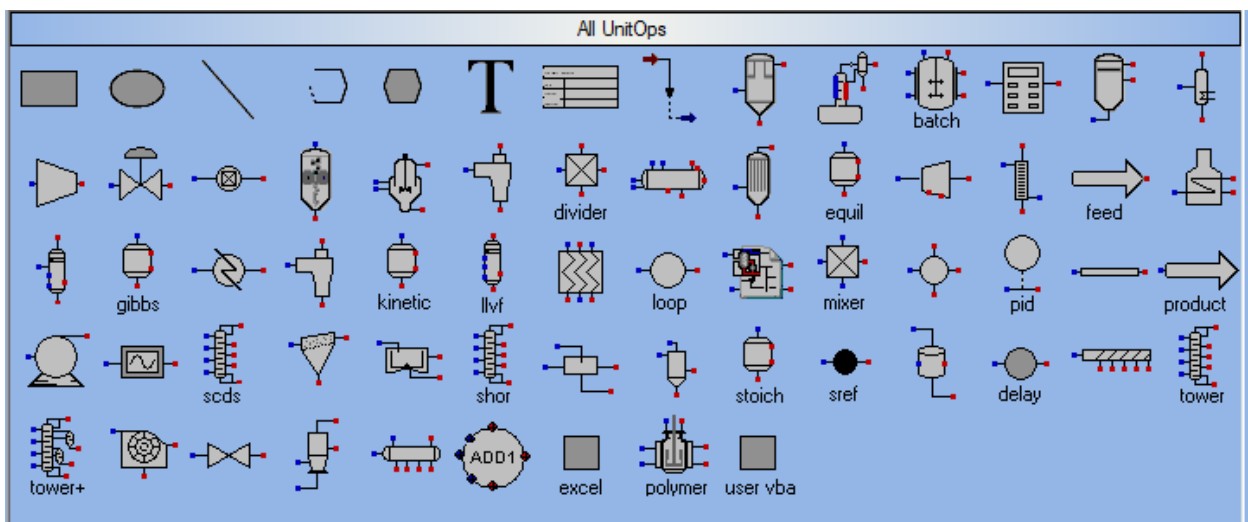


Рисунок 3.3 – Бібліотека апаратів у ChemCad

3.3 Складання технологічної схеми

Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану містить 13 апаратів, 2 вхідних та 2 вихідних потоки. Складаємо схему у програмі ChemCad (рис. 3.4) у відповідності до схеми зображеної на рис. 1.2 [45-47].

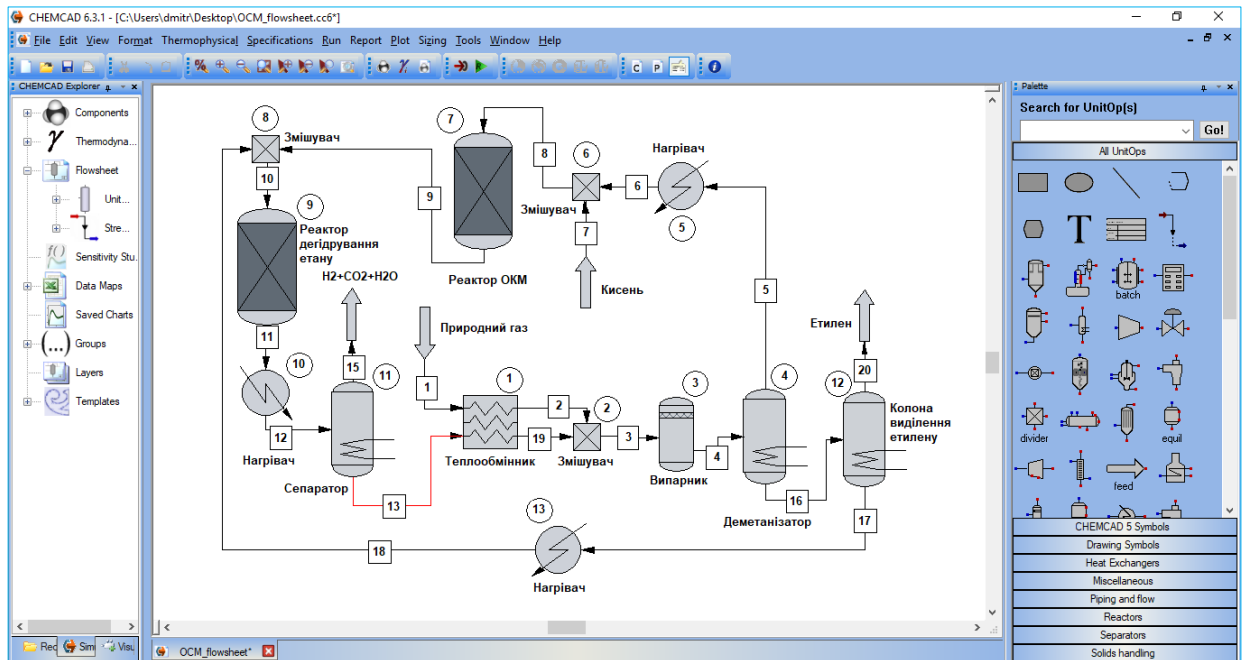


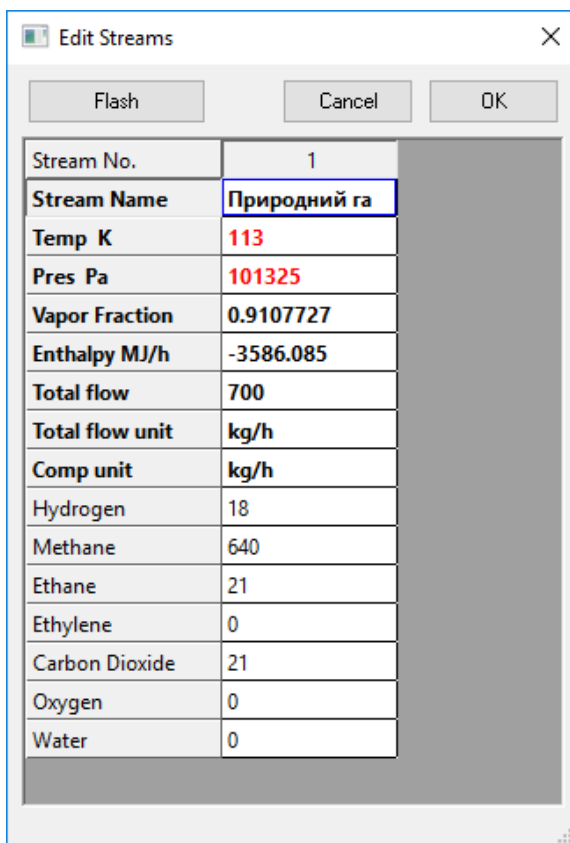
Рисунок 3.4 – Схема процесу окислювальної конденсації метану складена у середовищі ChemCad 6.3.1

Як можна бачити з рис. 3.4, вхідними потоками є природний газ (Natural gas) та кисень (Oxygen), а вихідними потоками є етилен (Ethylene) та суміш водню, вуглекислого газу та води ($H_2+CO_2+H_2O$).

При складанні технологічної схеми були використані наступні апарати: 1, 5, 10, 13 – теплообмінники; 2, 6, 8 – змішувачі потоків; 3 – випарник; 4, 11, 12 – сепаратори; 7, 9 – реактори.

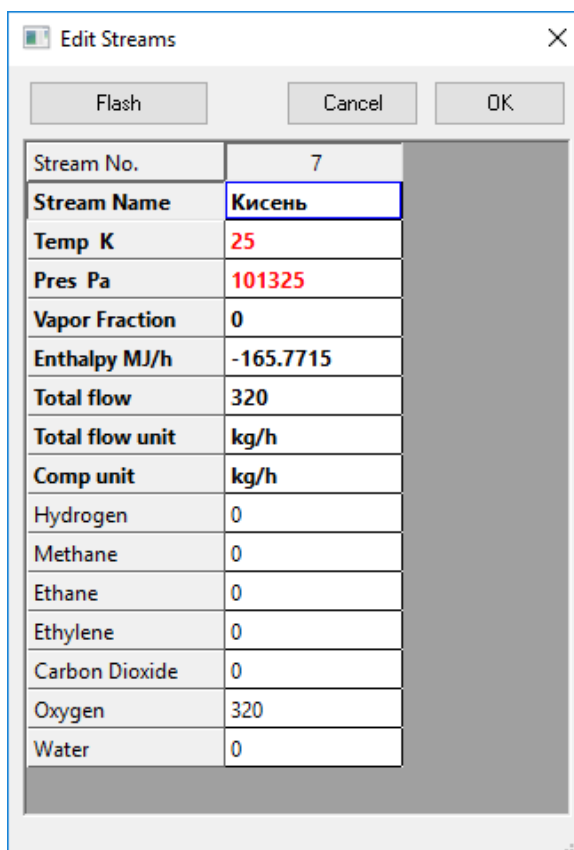
3.4. Налаштування параметрів потоків і апаратів

Для налаштування складеної схеми, необхідно задати вхідні потоки та налаштувати окремо кожен апарат. Задаємо вхідний потік 1 – зріджений природний газ (рис. 3.5) та вхідний потік 2 – кисень (рис. 3.6). У параметрах відповідних потоків вказуємо поточну температуру, тиск у трубопроводі, а також витрату компоненту (у нашому випадку загальна масова витрата у кг/год).



Stream No.	1
Stream Name	Природний га
Temp K	113
Pres Pa	101325
Vapor Fraction	0.9107727
Enthalpy MJ/h	-3586.085
Total flow	700
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Hydrogen	18
Methane	640
Ethane	21
Ethylene	0
Carbon Dioxide	21
Oxygen	0
Water	0

Рисунок 3.5 – Налаштування параметрів вхідного потоку природного газу



Stream No.	7
Stream Name	Кисень
Temp K	25
Pres Pa	101325
Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	-165.7715
Total flow	320
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Hydrogen	0
Methane	0
Ethane	0
Ethylene	0
Carbon Dioxide	0
Oxygen	320
Water	0

Рисунок 3.6 – Налаштування параметрів вхідного потоку кисню

Налаштуємо реактор реакції ОКМ, для цього задаємо наступні параметри у відповідному вікні (рис. 3.7): термічний режим – ізотермічний з температурою у реакторі 800 °С (1073 К); основний реагент – метан із ступенем перетворення 0,2. Після цього вказуємо стехіометричні коефіцієнти рівняння реакції.

The screenshot shows the 'Stoichiometric Reactor (REAC)' dialog box with the following settings:

- General Specifications:** ID: 7
- Specify Thermal Mode:**
 - 1. Adiabatic
 - 2. Isothermal: 1073 K
 - 3. Heat Duty: -3054.93 MJ/h
- Key Component:** 2 Methane
- Frac. Conversion:** 0.2
- Heat of Reaction:** J/kmol
- Reactor Pressure:** Pa
- Calc H of Reac.:** -8.7985e+007 J/kmol
- Stoichiometric Coefficients:** 0. Mole base

Hydrogen		Ethylene		Water	1
Methane	-2	Carbon Dioxide			
Ethane	1	Oxygen	-0.5		

Рисунок 3.7 – Налаштування параметрів реактора ОКМ

Аналогічним чином налаштуємо реактор дегідрування етану, для цього задаємо наступні параметри (рис. 3.8): термічний режим – ізотермічний з температурою у реакторі 600 °С (873 К); основний реагент – етан із ступенем перетворення 0,6. Після цього вказуємо стехіометричні коефіцієнти рівняння реакції.

Stoichiometric Reactor (REAC) -

General Specifications | More Components

ID: 9

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic

2. Isothermal 873 K

3. Heat Duty -99.4273 MJ/h

Key Component 3 Ethane

Frac. Conversion 0.6

Heat of Reaction J/kmol

Reactor Pressure Pa

Calc H of Reac. 1.36133e+008 J/kmol

Stoichiometric Coefficients: 0. Mole base

Hydrogen	1	Ethylene	1	Water	
Methane		Carbon Dioxide			
Ethane	-1	Oxygen			

Buttons: Help, Cancel, OK

Рисунок 3.8 – Налаштування параметрів реактора дегідрування етану

Для налаштування випарника необхідно вказати температуру випаровування 0°C (273 K), та тиск усередині випарника 101325 Па. На рис. 3.9 представлено вікно налаштувань випарника.

Multipurpose Flash (FLAS) -

Specifications | Cost Estimation

ID: 3

Flash Mode

2 Specify T and P; calculate V/F and Heat

Temperature 273 K

Pressure 101325 Pa

Calc. Heat duty -6286.45 MJ/h

Buttons: Help, Cancel, OK

Рисунок 3.9 – Налаштування параметрів випарника

Після налаштування параметрів усіх апаратів, потрібно запустити схему на розрахунок, натиснувши клавішу Run All. Інформацію кожного потоку можна переглянути, навівши курсором на протік. Приклад наведено на рис. 3.10.

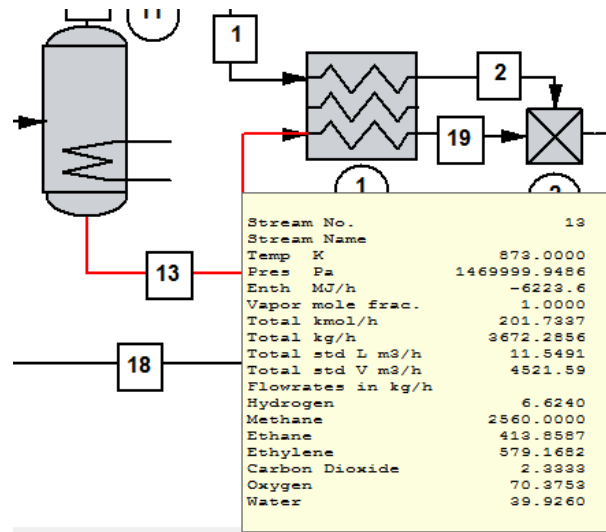


Рисунок 3.10 – Інформація про рецикл (потік №13)

3.5 Оцінювання ефективності технологічної схеми при використанні різних каталізаторів

Було проведено комп'ютерне моделювання процесу ОКМ у середовищі ChemCad 6.3.1 для перевірки правильності рішень, пропонованих розробленою СППР, використовуючи різні каталізатори, параметри яких наведені у табл. 3.1.

Таблиця 3.1 – Каталізатори процесу окислювальної конденсації метану

Каталізатор	Температура, °C	Конверсія CH ₄ , %	Селективність C ₂ -вуглеводнів, %	Вихід C ₂ -вуглеводнів, %	Швидкість реакції, молек/м ² с
Bi ₂ O ₃	800	21	66,8	14	6·10 ¹⁷
La ₂ O ₃	750	12,2	67,4	8,3	5,5·10 ²⁰
MgO	750	29	50	14,5	5·10 ¹⁶
Li/MgO	700	34	58	20	4·10 ¹⁷
LiCl/MnO ₂	750	47,2	64,7	30,8	7·10 ¹⁹

Результати моделювання представлені у вигляді матеріальних балансів та наведені у табл. 3.2-3.6.

Таблиця 3.2 – Матеріальний баланс схеми OCM_flowsheet_1

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	22,972	18,0	46,4
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	6,603	21,0	198,5
Етилен	0,000	14,042	0,0	393,9
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	19,946	0,0	359,3
Σ	59,998	64,040	1020,0	1019,1

Таблиця 3.3 – Матеріальний баланс схеми OCM_flowsheet_2

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	22,777	18,0	45,9
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	6,782	21,0	203,9
Етилен	0,000	13,846	0,0	388,4
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	19,931	0,0	359,1
Σ	59,998	63,812	1020,0	1018,3

Таблиця 3.4 – Матеріальний баланс схеми OCM_flowsheet_3

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	19,766	18,0	39,8
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	9,862	21,0	296,6
Етилен	0,000	10,837	0,0	304,0
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	20,001	0,0	360,3
Σ	59,998	60,943	1020,0	1021,7

Таблиця 3.5 – Матеріальний баланс схеми OCM_flowsheet_4

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	21,682	18,0	43,7
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	7,946	21,0	238,9
Етилен	0,000	12,753	0,0	357,8
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	20,001	0,0	360,3
Σ	59,998	62,859	1020,0	1021,7

Таблиця 3.6 – Матеріальний баланс схеми OCM_flowsheet_5

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	23,605	18,0	47,6
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	6,024	21,0	181,1
Етилен	0,000	14,675	0,0	411,7
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	20,001	0,0	360,3
Σ	59,998	64,040	1020,0	1021,7

Як можна бачити, матеріальні баланси збігаються з похибкою близько 0.1%, що свідчить про коректність балансових розрахунків. У табл. 3.7 наведено характеристики технологічних схем з різними каталізаторами.

Таблиця 3.7 – Продуктивність технологічної схеми процесу ОКМ при використанні різних каталізаторів

Назва схеми у програмі	Використаний каталізатор	Продуктивність, кг/год
OCM_flowsheet_1	Bi_2O_3	393,9
OCM_flowsheet_2	La_2O_3	388,4
OCM_flowsheet_3	MgO	304,0
OCM_flowsheet_4	Li/MgO	357,8
OCM_flowsheet_5	LiCl/MnO_2	411,7

На основі отриманих результатів побудовано порівняльну діаграму ефективності каталізаторів, яка зображена на рис. 3.11.

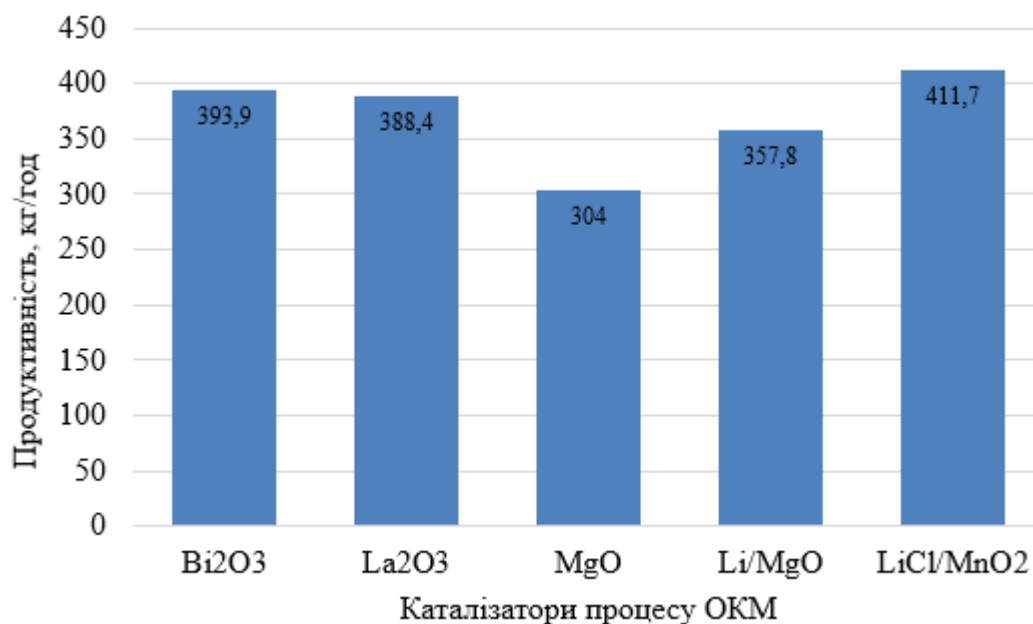


Рисунок 3.11 – Порівняльна діаграма ефективності каталізаторів

З рис. 3.11 видно, що найбільш ефективним є каталізатор LiCl/MnO₂, який забезпечує найвищу продуктивність технологічної схеми, рівну 411,7 кг етилену на годину.

3.6 Висновки за розділом

Для перевірки ефективності рішень СППР із вибору каталізатору було проведено серію комп'ютерних експериментів у середовищі ChemCad 6.3.1 із технологічною схемою окислювальної конденсації метану з різними варіантами каталізаторів. При моделюванні розглядалися 5 каталізаторів з визначеними характеристиками. Порівняння ефективності проводилося на основі отриманих продуктивностей технологічних схем. За результатами моделювання найбільш ефективною виявилася схема з використанням каталізатору LiCl/MnO₂, який був рекомендований у СППР як найкращий. З цього видно, що рішення запропоновані СППР можуть впроваджуватись при реалізації відповідного виробництва.

ВИСНОВКИ

1. Проведений огляд науково-технічної і патентної літератури показав, що в даний час процес окислювальної конденсації метану є перспективним, проте не має промислової реалізації, не дивлячись на те що механізм реакції вже давно відомий.
2. Оскільки процес є каталітичним, то при виборі каталізатора необхідно враховувати параметри самої реакції ОКМ, такі як: температура, конверсія CH_4 , селективність C_2 -вуглеводнів, вихід C_2 -вуглеводнів, швидкість реакції, тощо.
3. Було розроблено систему підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора, яка містить дві інтелектуальні компоненти: перша з них базується на застосуванні методу аналізу ієрархій та потребує участі людини-експерта, друга – на методах інтелектуальної обробки даних у середовищі See5 без участі фахівця. Роботу системи було випробувано на прикладах вибору каталізатора процесу ОКМ.
4. Після оцінювання ефективності обраного каталізатора, було проведено комп'ютерне моделювання варіантів технологічної схеми процесу з використанням різних каталізаторів у середовищі ChemCad. За результатами було обрано кращий варіант схеми.
5. За результатами магістерської дисертації було опубліковано 1 статтю та 6 тез доповідей, які доповідалися і обговорювалися на Всеукраїнських та Міжнародних конференціях.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Аншиц А. Г. Окислительная конденсация метана – новый процесс переработки природного газа [Текст] / А. Г. Аншиц, Е. Н. Воскресенская // Соросовский образовательный журнал. – М.: ISSEP, 1999. – №9. – С. 38-43.
2. Окислительная конденсация метана в присутствии лантан-цериевых катализаторов: фундаментальный характер эффекта неаддитивности [Текст] / А. Г. Дедов, А. С. Локтев, Н. О. Тельпуховская и др. // Химия и технология топлив и масел. – 2010. – № 2 (558). – С. 43-46.
3. Пат. 2447048 Российская Федерация, МПК C07C 11/04, C07C 2/84. Комбинированный способ производства этилена и его производных и электроэнергии из природного газа / Арутюнов В. С., Синев М. Ю., Шафрановский П. А; патентообладатель Закрытое акционерное общество "ШАГ". – № 2010142090/04; заявл. 14.10.2010; опубл. 10.04.2012, Бюл. № 10.
4. Окислительная конденсация метана в этилен: влияние способа приготовления на фазовый состав и каталитические свойства композитных материалов Li–W–Mn–O–SiO₂ [Текст] / А. Г. Дедов, А. С. Локтев, Г. Д. Нипан и др. // Нефтехимия. – 2015. – Том 55, №2. – С. 171-176.
5. Fini T. Oxidative Coupling of Methane to Ethylene: Senior Design Reports [Text] / T. Fini, C. Patz, R. Wentzel. – 2014. – 268 p.
6. A novel technology for Natural Gas conversion by means of integrated Oxidative Coupling and Dry Reforming of Methane [Text] / J. W. Thybaut, G. B. Marin, C. Mirodatos and other // Chemie Ingenieur Technik. – 2014. – Vol. 86, Issue № 11. – P. 1855-1870.
7. Quantitative screening of an extended oxidative coupling of methane catalyst library [Text] / V.I. Alexiadis, M. Chaar, A. van Veen and other // Applied Catalysis B: Environmental. – 2016. – Vol. 199. – P. 252-259.

8. Nghiem Xuan Son. Ethylene Production by Oxidative Coupling of Methane: New Process Flow Diagram Based on Adsorptive Separation (Dissertation) [Text] / Nghiem Xuan Son. – Berlin, 2014. – 142 p.
9. Мамедов Э. А. Окислительная дегидродимеризация углеводородов [Текст] / Э. А. Мамедов, В. Д. Соколовский // Новосибирск: Наука, 1992. – 186 с.
10. Миначев Х. М. Окислительная конденсация метана – новый путь синтеза этана, этилена и других углеводородов [Текст] / Х. М. Миначев и др. // Успехи химии. – 1988. – №3. – С. 221-233.
11. Karimi A. Catalytic oxidative coupling of methane – experimental investigation and optimization of operational conditions [Text] / A. Karimi and other // Petroleum & Coal – 2007. – Vol.49. – №3. – P. 36-40.
12. Махлин В. А. Окислительная димеризация метана: кинетика, математическое моделирование и оптимизация процесса на La/Ce катализаторах [Текст] / В. А. Махлин и др. // Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). – 2008. – №5. – С. 73-79.
13. Siluria Announces One Year of Successful Operations of its Disruptive Ethylene Technology [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.prnewswire.com/news-releases/siluria-announces-one-year-of-successful-operations-of-its-disruptive-ethylene-technology-300266816.html> (дата звернения: 15.04.2018). – Назва з екрана.
14. Chasing the Dream of Half-Price Gasoline from Natural Gas [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.technologyreview.com/s/523146/chasing-the-dream-of-half-price-gasoline-from-natural-gas/> (дата звернения: 15.04.2018). – Назва з екрана.
15. Арутюнов В. С. Окислительные превращения метана [Текст] / В. С. Арутюнов, О. В. Крылов. – М.: Наука, 1998. – 361 с.

16. Дорохов И. Н. Системный анализ процессов химической технологии: Экспертные системы для совершенствования промышленных процессов гетерогенного катализа [Текст] / И. Н. Дорохов, В. В. Кафаров. – М.: Наука, 1989. – 376 с.
17. Бармин И. В. Сжиженный природный газ вчера, сегодня, завтра [Текст] / И. В. Бармин, И. Д. Кунис. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009. – 129 с.
18. Етилен [Электронный ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступа: <https://uk.wikipedia.org/wiki/Етилен> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
19. Вацулик П. Химия мономеров [Текст] / П. Вацулик. – Том 1. – Перевод с чешского к.т.н. А. А. Артемьева и Б. М. Вольфсона. – М.: Издательство иностранной литературы, 1960. – 736 с.
20. У "Карпатнафтохім" готуються запустити роботу підприємства навесні - уся надія на інвесторів [Електронний ресурс] : [Інтернет-портал]. – Електронні дані. – [Івано-Франківськ: Агенція новин Firtka.if.ua, 2017]. – Режим доступа: <http://firtka.if.ua/blog/view/u-karpatnaftohim-gotuutsa-zapustiti-robotu-pidpriemstva-navesni-usa-nadia-na-investoriv66560> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
21. Виробництво етилену і поліетилену [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані. – [Івано-Франківськ: ТОВ "КАРПАТНАФТОХІМ", 2017]. – Режим доступа: <http://www.knh.com.ua/production/virobnitstvo-etilenu-i-polietilenu/> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
22. Крылов О. В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие для вузов [Текст] / О. В. Крылов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2004. – 679 с.
23. Stunkel S. Ethylene production via oxidative coupling of methane (OCM) – investigation of alternative separation processes [Text] / S. Stunkel, J.-U. Repke, G. Wozny // *Czasopismo Techniczne* – 2008. – Vol. 105. – №5-М. – P. 285-291.

24. Система підтримки рішень [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: https://uk.wikipedia.org/wiki/Система_підтримки_рішень (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
25. Шаган Д. В. Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2018: Збірник наукових статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – С. 70-72.
26. Бугаєва Л. М. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів: підручник [Текст] / Л. М. Бугаєва, Т. В. Бойко, Ю. О. Безносик. – К.: «Інтерсервіс», 2017. – 254 с.
27. С++ [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: <https://uk.wikipedia.org/wiki/С%2B%2B> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
28. Мова С++ отримує високу оцінку за продуктивність завдяки новому стандарту ISO/IEC [Електронний ресурс] : [Інтернет-портал]. – Електронні дані. – [Інформаційне забезпечення у сфері технічного регулювання ДП "Укрметртестстандарт", 2016]. – Режим доступу: http://csm.kiev.ua/index.php?option=com_content&view=article&id=1056 (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
29. Сорока К. О. Основи теорії систем і системного аналізу: Навч. Посібник [Текст] / К. О. Сорока. – ХНАМГ, 2004. – 291 с.
30. Саати Т. Принятие решений. Метод анализа иерархий [Текст] / Т. Саати. – Перевод с английского Р. Г. Вачнадзе – М.: «Радио и Связь», 1993. – 278 с.
31. Хомяков В. І. Менеджмент підприємства [Текст] : навч. посібник / В. І. Хомяков. – К.: Кондор, 2005. – 434 с.

32. Волкова В. Н. Моделирование систем и процессов: учебник для академического бакалавриата [Текст] / В. Н. Волкова, В. Н. Козлов. – М.: Издательство Юрайт, 2014. – 588 с.
33. Метод аналізу ієрархій – Wiki TNEU [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: http://wiki.tneu.edu.ua/index.php?title=Метод_аналізу_ієрархій (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.
34. Шаган Д. В. Використання методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2018): збірник тез доповідей Першої Міжнародної (Одинадцятої Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 27-29 березня 2018 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса. – Вінниця, 2018. – С. 276.
35. Шаган Д. В. Розроблення програми для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану за методом аналізу ієрархій / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали IV Всеукраїнської науково-практичної конференції, 23-27 квітня 2018 р., м. Рубіжне. – Рубіжне, 2018.
36. Шаган Д. В. Розроблення системи підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Збірка тез доповідей VII Міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих учених з хімії та хімічної технології (11-13 квітня 2018 р., м. Київ). – Київ, 2018. – С. 196.
37. Інформаційні технології та моделювання бізнес-процесів. Навч. посіб. [Текст] / О. М. Томашевський, Г. Г. Цегелик, М. Б. Вітер, В. І. Дубук. – К.: Видавництво «Центр учбової літератури», 2012. – 296 с.
38. Плєскач В. Л. Інформаційні системи і технології на підприємствах: підручник [Текст] / В. Л. Плєскач, Т. Г. Затонацька. – К.: Знання, 2011. – 718 с.

39. Шарапов О. Д. Економічна кібернетика: Навч. посібник. [Текст] / О. Д. Шарапов, В. Д. Дербенцев, Д. Є. Семьонов. – К.: КНЕУ, 2004. – 231 с.
40. Schapire R. E. The Boosting Approach to Machine Learning An Overview [Text] / R. E. Schapire // – New Jersey, 2002. – 23 p.
41. Quinlan J. R. Bagging, boosting, and C4.5 [Text] / J. R. Quinlan // Proceedings of the Thirteenth National Conference on Artificial Intelligence. – 1996. – P. 725-730.
42. Michorczyk B. Study of Oxidative Coupling of Methane integrated with CO Oxidation [Text] / B. Michorczyk, E. Hedrzak // Czasopismo Techniczne – Cracow, 2017. – №2 – P. 71-81.
43. Зиятдинов Н.Н. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad. Учебно-методическое пособие [Текст] / Н. Н. Зиятдинов, Т. В. Лаптева, Д. А. Рыжов. – Казань, КГТУ, 2008. – 160 с.
44. Савельев Н. И. Балансовые расчеты химико-технологических процессов: учеб. пособие. [Текст] / Н. И. Савельев. – Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та, 2014. – 136 с.
45. Шаган Д. В. Комп'ютерне моделювання процесу окислювальної конденсації метану [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2017): збірник тез доповідей Десятої Української наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю, 27-29 березня 2017 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, ТОВ "Нілан-ЛТД". – 2017. – С. 234.
46. Шаган Д. В. Моделювання технологічної схеми окислювальної конденсації метану у середовищі Chemcad [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // П'ятий том збірника тез доповідей VIII Міжнародної науково-технічної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та сучасні технології», 26-28 квітня 2017 р. – Дніпро. – 2017. – С. 47-48.

47. Шаган Д. В. Оцінка впливу технологічного процесу – окислювальної конденсації метану на навколишнє середовище [Текст] / Д. В. Шаган, Л. М. Бугаєва. // Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали III Всеукраїнської науково-практичної конференції, 18-24 квітня 2017 р., м. Рубіжне. – Харків: Мачулін, 2017. – С. 233-235.

ДОДАТОК А

Програмний код інтелектуальної системи підтримки прийняття рішень для
вибору каталізатора

```

#pragma endregion
private: System::Void UserForm_Load(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    button_run_AHP->TabIndex = 0;
    pictureBox1->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\LOGO.png");
    запуситиПрограмуАHPToolStripMenuItem->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\VS.jpg");
    відкритиБДПрограмиАHPToolStripMenuItem->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\ACCESS.png");
    запуситиПрограмуSee5ToolStripMenuItem->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\SEE5.jpg");
    відкритиБДПрограмиSee5ToolStripMenuItem->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\NOTEPAD.png");
    запуситиПрограмуChemCadToolStripMenuItem->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\DSS_Diploma_project_Dmytrii_Sahan\\Images\\CHEMCAD.png");
}
private: System::Void button_run_AHP_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Process::Start("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\AHP.exe");
}
private: System::Void button_run_SEE5_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Process::Start("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\See5-demo.exe");
}
private: System::Void button_run_CHEMCAD_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Process::Start("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\OCM_flowsheet.cc6");
}
private: System::Void відкритиБДПрограмиАHPToolStripMenuItem_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Process::Start("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\DataBase.mdb");
}
private: System::Void відкритиБДПрограмиSee5ToolStripMenuItem_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Process::Start("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\Data_catalyst.data");
}
private: System::Void завершитиРоботуToolStripMenuItem_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    Close();
}
private: System::Void інструкціяКористувачаToolStripMenuItem_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    MessageBox::Show("Програма для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій призначена для декомпозиції проблеми та поетапному встановленні пріоритетів на основі попарних порівнянь." + "\r\n" + "\r\n" + "Програма See5 призначена для інтелектуальної обробки експериментально отриманих даних базуючись на дереві рішень." + "\r\n" + "\r\n" + "Програма ChemCad призначена для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів.", "Інструкція користувача", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
}

```

```
private: System::Void проПрограмуToolStripMenuItem_Click(System::Object^ sender,
    System::EventArgs^ e) {
    MessageBox::Show("Система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора" +
        "\r\n" + "\r\n" + "Версія 1.0 beta" + "\r\n" + "\r\n" + "Розробник: Шаган Дмитрій  

        Володимирович" + "\r\n" + "Науковий керівник: Бугаєва Людмила Миколаївна" + "\r\n"
        + "\r\n" + "Copyright © 2018. All rights reserved.", "Про програму",
        MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
}
};
}
```

ДОДАТОК Б

Програмний код програми для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій

```

#pragma endregion
    DataSet ^ НабірДаних;
    OleDbDataAdapter ^ Адаптер;
    OleDbConnection ^ Підключення;
    OleDbCommand ^ Команда;

    array<String^>^ katalizator = gcnw array<String^>(5);
    array<String^>^ kryteriy = gcnw array<String^>(5);
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуваннямToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення назв каталізаторів
    textBox_A1->Text = "Bi2O3";
    textBox_A2->Text = "La2O3";
    textBox_A3->Text = "MgO";
    textBox_A4->Text = "Li/MgO";
    textBox_A5->Text = "LiCl/MnO2";

    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView2
    array<double, 2>^ arr_data = gcnw array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 0.2, 0.2, 0.143, 0.33 },
        { 5, 1, 2, 0.5, 0.33 },
        { 5, 0.5, 1, 0.5, 0.33 },
        { 7, 2, 2, 1, 2 },
        { 3, 3, 3, 0.5, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView2->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data[i, j].ToString();
        }
    }
}
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуванням1ToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView4
    array<double, 2>^ arr_data_1 = gcnw array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 0.2, 0.2, 0.143, 0.2 },
        { 5, 1, 1, 0.33, 1 },
        { 5, 1, 1, 0.33, 1 },
        { 7, 3, 3, 1, 3 },
        { 5, 1, 1, 0.33, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView4->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data_1[i, j].
            ToString();
        }
    }
}
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуванням2ToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView6
    array<double, 2>^ arr_data_2 = gcnw array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 5, 0.5, 0.33, 0.2 },
        { 0.2, 1, 0.33, 0.25, 0.111 },
        { 2, 3, 1, 0.5, 0.25 },
        { 3, 4, 2, 1, 0.33 },

```

```

        { 5, 9, 4, 3, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView6->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data_2[i, j].
            ToString();
        }
    }
}
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуванням3ToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView8
    array<double, 2>^ arr_data_3 = gcnew array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 1, 6, 3, 2 },
        { 1, 1, 6, 3, 2 },
        { 0.167, 0.167, 1, 0.33, 0.2 },
        { 0.33, 0.33, 3, 1, 0.33 },
        { 0.5, 0.5, 5, 3, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView8->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data_3[i, j].
            ToString();
        }
    }
}
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуванням4ToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView10
    array<double, 2>^ arr_data_4 = gcnew array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 5, 1, 0.33, 0.143 },
        { 0.2, 1, 0.2, 0.167, 0.111 },
        { 1, 5, 1, 0.33, 0.143 },
        { 3, 6, 3, 1, 0.25 },
        { 7, 9, 7, 4, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView10->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data_4[i, j].
            ToString();
        }
    }
}
private: System::Void ввестиДаніЗаЗамовчуванням5ToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    //Автоматичне заповнення комірок dataGridView12
    array<double, 2>^ arr_data_5 = gcnew array<double, 2>(5, 5) {
        { 1, 0.143, 2, 1, 0.2 },
        { 7, 1, 9, 7, 2 },
        { 0.5, 0.111, 1, 0.5, 0.167 },
        { 1, 0.143, 2, 1, 0.2 },
        { 5, 0.5, 6, 5, 1 }
    };
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        for (int j = 0; j < 5; j++) {
            dataGridView12->Rows[i]->Cells[j]->Value = arr_data_5[i, j].
            ToString();
        }
    }
}
private: System::Void інструкціяКористувачаToolStripMenuItem_Click(System::Object^
sender, System::EventArgs^ e) {
    tabControl1->SelectedTab = tabPage9;
}
}

```

```

private: System::Void UserForm_Load(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e) {
    pictureBox1->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\Diploma_
    project__Dmytrii_Shahan\\Diploma_project__Dmytrii_Shahan\\LOGO.jpeg");
    pictureBox2->Image = Image::FromFile("C:\\Users\\dmitr\\Desktop\\СППР\\Diploma_
    project__Dmytrii_Shahan\\Diploma_project__Dmytrii_Shahan\\Levels.jpg");
    НабірДаних = gcnew DataSet();
    Підключення = gcnew OleDbConnection("Data Source=DataBase.mdb; User ID = Admin;
    Provider = Microsoft.Jet.OLEDB.4.0; ");
    Команда = gcnew OleDbCommand();
    Адаптер = gcnew OleDbDataAdapter("Select * From [DB_catalyst]", Підключення);
    button_Read_DB->TabIndex = 0;
    tabPage3->Parent = nullptr;
    tabPage4->Parent = nullptr;
    tabPage5->Parent = nullptr;
    tabPage6->Parent = nullptr;
    tabPage7->Parent = nullptr;
    tabPage8->Parent = nullptr;
    tabPage10->Parent = nullptr;
}
private: System::Void button_Read_DB_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    // Імпорт записів із бази даних:
    try
    {
        if (Підключення->State == ConnectionState::Closed) {
            Підключення->Open();
        }
        Адаптер = gcnew OleDbDataAdapter("Select * From [DB_catalyst]",
        Підключення);
        // Заповнюємо DataSet результатом SQL-запиту
        Адаптер->Fill(НабірДаних, "DB_catalyst");
        // Вміст DataSet у вигляді рядка XML для відладки:
        String ^ РядокXML = НабірДаних->GetXml();
        // Вказуємо джерело даних для сітки даних:
        dataGridView1->DataSource = НабірДаних;
        // Вказуємо ім'я таблиці в наборі даних:
        dataGridView1->DataMember = "DB_catalyst";
        Підключення->Close();
        // Редагування оформлення таблиці
        dataGridView1->CurrentCell = nullptr;
        dataGridView1->Columns[2]->HeaderCell->Value = "Температура, С";
        dataGridView1->Columns[3]->HeaderCell->Value = "Конверсія СН4, %";
        dataGridView1->Columns[4]->HeaderCell->Value = "Селективність С2-
        вуглеводнів, %";
        dataGridView1->Columns[5]->HeaderCell->Value = "Вихід С2-вуглеводнів, %";
        dataGridView1->Columns[6]->HeaderCell->Value = "Швидкість реакції,
        молек/м^2*с";
    }
    catch (Exception ^ Ситуація)
    {
        MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Імпорт записів", MessageBoxButtons
        ::OK, MessageBoxIcon::Error);
    }
}
private: System::Void button_Save_DB_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    // Оновлення записів у базі даних
    try
    {
        if(Підключення->State == ConnectionState::Closed){
            Підключення->Open();
        }
    }
}

```

```

Команда->CommandText = "UPDATE [DB_catalyst] SET [Каталізатор] =?,
[Температура] =?, [Конверсія_СН4] = ? , [Селективність_С2-вуглеводнів] = ?,
[Вихід_С2-вуглеводнів] =?, [Швидкість_реакції] =? " + " WHERE([№з/п] = ?)";
// Ім'я, тип і довжина параметра
Команда->Parameters->Add("Каталізатор", OleDbType::VarChar, 20,
"Каталізатор");
Команда->Parameters->Add("Температура", OleDbType::Integer, 20,
"Температура");
Команда->Parameters->Add("Конверсія_СН4", OleDbType::Double, 20,
"Конверсія_СН4");
Команда->Parameters->Add("Селективність_С2-вуглеводнів", OleDbType::Double,
20, "Селективність_С2-вуглеводнів");
Команда->Parameters->Add("Вихід_С2-вуглеводнів", OleDbType::Double, 20,
"Вихід_С2-вуглеводнів");
Команда->Parameters->Add("Швидкість_реакції", OleDbType::Double, 20,
"Швидкість_реакції");
Команда->Parameters->Add(gcnew OleDbParameter("Original_№з/п", OleDbType
::Integer, 0, System::Data::ParameterDirection::Input, false, (Byte)0,
(Byte)0, "№з/п", System::Data::DataRowVersion::Original, nullptr));
Адаптер->UpdateCommand = Команда;
Команда->Connection = Підключення;
// Update повертає кількість змінених рядків
int kol = Адаптер->Update(НабірДаних, "DB_catalyst");
if(kol > 0)
    MessageBox::Show("Оновлено таку кількість записів: " + kol,
"Оновлення записів", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
Information);
if (kol == 0)
    MessageBox::Show("На жаль, оновлення записів не відбулося, тому що
жодних змін не було виявлено", "Оновлення записів",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
Підключення->Close();
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Оновлення записів", MessageBoxButtons
::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_Add_DB_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    // Додавання запису до бази даних
    try
    {
        if (Підключення->State == ConnectionState::Closed) {
            Підключення->Open();
        }
        String^ Numb = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
порядковий номер:", L"Додавання запису. Введення даних", L"3", 500, 300);
        if (Numb == "") {
            MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
            Підключення->Close();
            return;
        }
        String^ Kat = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть назву
каталізатора:", L"Додавання запису. Введення даних", L"Са-руда", 500, 300);
        if (Kat == "") {
            MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
            Підключення->Close();
            return;
        }
    }
}

```

```

}
String^ Temp = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
значення температури:", L"Додавання запису. Введення даних", L"870", 500,
300);
if (Temp == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
String^ KonvCH4 = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
значення конверсії CH4:", L"Додавання запису. Введення даних", L"28", 500,
300);
if (KonvCH4 == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
String^ SelC2 = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
значення селективності C2-вуглеводнів:", L"Додавання запису. Введення
даних", L"77.5", 500, 300);
if (SelC2 == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
String^ VyhC2 = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
значення виходу C2-вуглеводнів", L"Додавання запису. Введення даних",
L"22.2", 500, 300);
if (VyhC2 == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
String^ ShvReak = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
значення швидкості реакції", L"Додавання запису. Введення даних",
L"2.7E+17", 500, 300);
if (ShvReak == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Додавання запису. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
// Створення примірника об'єкта OleDbCommand із завданням SQL-запиту:
auto Команда = gcnnew OleDbCommand("INSERT INTO [DB_catalyst] ([№з/п],
[Каталізатор], [Температура], [Конверсія_CH4], [Селективність_C2-
вуглеводнів], [Вихід_C2-вуглеводнів], [Швидкість_реакції]) VALUES (" + Numb
+ ", '" + Kat + "', " + Int32::Parse(Temp) + ", " + KonvCH4 + ", " + SelC2
+ ", " + VyhC2 + ", " + ShvReak + ")");
// Для додавання запису в таблицю БД ця команда обов'язкова:
Команда->Connection = Підключення;
// Виконання команди SQL:
int i = Команда->ExecuteNonQuery();
MessageBox::Show("До бази даних додано " + i.ToString() + " новий запис",
"Додавання записів", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
Підключення->Close();

```

```

}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Додавання записів", MessageBoxButtons
        ::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}

private: System::Void button_Choice_DB_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
    e) {
    // Вибір записів із бази даних
    try
    {
        if (Підключення->State == ConnectionState::Closed) {
            Підключення->Open();
        }
        String^ SelCol = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Повністю
            введіть назву стовбчика за яким буде проводитися вибір", L"Вибір записів.
            Введення даних", L"", 500, 300);
        if (SelCol == "") {
            MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
                ласка, повторіть спробу", "Вибір записів. Введення даних. Помилка",
                MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
            Підключення->Close();
            return;
        }
        String^ SelZn = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
            параметр за яким буде проводитися вибір", L"Вибір записів. Введення даних",
            L"", 500, 300);
        if (SelZn == "") {
            MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
                ласка, повторіть спробу", "Вибір записів. Введення даних. Помилка",
                MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
            Підключення->Close();
            return;
        }
        if ((SelCol != "Каталізатор") && (SelCol != "Температура"))
            Адаптер = gcnew OleDb::OleDbDataAdapter("Select * From [DB_catalyst]
                WHERE " + SelCol + " = " + SelZn, Підключення);
        else if (SelCol == "Температура")
            Адаптер = gcnew OleDb::OleDbDataAdapter("Select * From [DB_catalyst]
                WHERE " + SelCol + " = " + Int32::Parse(SelZn), Підключення);
        else
            Адаптер = gcnew OleDb::OleDbDataAdapter("Select * From [DB_catalyst]
                WHERE " + SelCol + " = '" + SelZn + "'", Підключення);
        НабірДаних = gcnew DataSet();
        Адаптер->Fill(НабірДаних, "DB_catalyst");
        String ^ РядокXML = НабірДаних->GetXml();
        dataGridView1->DataSource = НабірДаних;
        dataGridView1->DataMember = "DB_catalyst";
        Підключення->Close();
    }
    catch (Exception ^ Ситуація)
    {
        MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Вибір записів із бази даних",
            MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    }
}

private: System::Void button_Delete_DB_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
    e) {
    // Видалення записів із бази даних
    try
    {
        Підключення->Open();
    }
}

```

```

String^ SelCol2 = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Повністю
введіть назву стовбчика за яким буде проводитися пошук елементів для
видалення", L"Видалення записів. Введення даних", L"", 500, 300);
if (SelCol2 == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Видалення записів. Введення даних.
Помилка", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
String^ SelZn2 = Microsoft::VisualBasic::Interaction::InputBox(L"Введіть
параметр за яким буде проводитися вибір", L"Видалення записів. Введення
даних", L"", 500, 300);
if (SelZn2 == "") {
    MessageBox::Show("Значення не введено або операція перервана. Будь
ласка, повторіть спробу", "Видалення записів. Введення даних. Помилка",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    Підключення->Close();
    return;
}
// Створюємо об'єкт класу Command, передаючи йому SQL-команду
auto Команда = gcnew OleDbCommand("Delete * From [DB_catalyst] Where " +
SelCol2 + " Like " + SelZn2, Підключення);
// Виконання команди SQL
int i = Команда->ExecuteNonQuery();
// i - кількість видалених записів
if (i > 0)
    MessageBox::Show("Вилучено таку кількість записів: " + i.ToString() +
", які містять в стовбчику '" + SelCol2 + "' фрагмент '" + SelZn2 +
"'", "Видалення записів", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
Information);
if (i == 0) {
    MessageBox::Show("Запис, що містить в стовбчику '" + SelCol2 + "'
фрагмент '" + SelZn2 + "'", не знайдено", "Видалення записів",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
    Підключення->Close();
}
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Видалення записів із бази даних",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_Clear_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    // Очищення таблиці DataGridView1
    try
    {
        НабірДаних->Clear();
        dataGridView1->DataSource = nullptr;
        dataGridView1->Rows->Clear();
        dataGridView1->Columns->Clear();
    }
    catch (Exception ^ Ситуація)
    {
        MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Очищення таблиці", MessageBoxButtons::
OK, MessageBoxIcon::Error);
    }
}
}
/*
Розрахунок. Крок 1
*/

```

```

private: System::Void button_step_1_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    dataGridView2->RowCount = 5;
    dataGridView3->RowCount = 5;
    dataGridView2->RowHeadersWidth = 140;
    dataGridView2->Rows[0]->HeaderCell->Value = "[1] Температура";
    dataGridView2->Rows[1]->HeaderCell->Value = "[2] Конверсія СН4";
    dataGridView2->Rows[2]->HeaderCell->Value = "[3] Селективність";
    dataGridView2->Rows[3]->HeaderCell->Value = "[4] Вихід С2-вугл.";
    dataGridView2->Rows[4]->HeaderCell->Value = "[5] Швидкість р-ї";
    kryteriy[0] = "Температура";
    kryteriy[1] = "Конверсія СН4";
    kryteriy[2] = "Селективність";
    kryteriy[3] = "Вихід С2-вуглев.";
    kryteriy[4] = "Швидкість реакції";
    tabPage3->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage3;
    ввестиДанізаЗамовчуваннямToolStripMenuItem->Enabled = true;
    button_step_1->Enabled = false;
    початиРоботуToolStripMenuItem->Enabled = false;
}
private: System::Void button_calc_0_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b, alpha_max, CI, CR;
    array<double, 2>^ arr_kr = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    array<double>^ arr_w = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    dataGridView2->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView3->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        katalizator[0] = textBox_A1->Text;
        katalizator[1] = textBox_A2->Text;
        katalizator[2] = textBox_A3->Text;
        katalizator[3] = textBox_A4->Text;
        katalizator[4] = textBox_A5->Text;

        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr[i, j] = double::Parse(dataGridView2->Rows[i]->Cells[j]
                    ->Value->ToString());
            }
        }

        //Визначення коефіцієнтів важливості елементів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_b[i] = arr_b[i] * arr_kr[i, j];
            }
            arr_b[i] = pow(arr_b[i], 0.2);
        }

        //Визначення нормованого значення пріоритетів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            sum_b = sum_b + arr_b[i];
        }
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            arr_w[i] = arr_b[i] / sum_b;
            dataGridView3->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w[i].ToString("F5");
        }
    }
}

```

```

//Визначення максимального власного значення матриці
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    for (int j = 0; j < 5; j++) {
        arr_dod[i] = arr_dod[i] + (arr_kr[i, j] * arr_w[j]);
    }
    alpha_max = alpha_max + arr_dod[i];
}
textBox_alfa_0->Text = alpha_max.ToString("F5");

//Визначення Індекса погодженості CI
CI = (alpha_max - 5) / 4;
textBox_CI_0->Text = CI.ToString("F5");

//Визначення Відношення погодженості CR
CR = CI / 1.12;
textBox_CR_0->Text = CR.ToString("F5");

//Виведення результатів
if ((CR >= 0) && (CR <= 0.1)) {
    button_graph_0->Enabled = true;
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " +
        CR.ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
        можна продовжувати", "Результати. Крок 1", MessageBoxButtons::OK,
        MessageBoxIcon::Information);
}
else
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " +
        CR.ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
        виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
        "Результати. Крок 1", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 1", MessageBoxButtons
        ::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_graph_0_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
    e) {
    chart0->Series["Series1"]->Points->Clear();
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        chart0->Series["Series1"]->Points->AddXY(kryteriy[i], double::Parse
            (dataGridView3->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
    }
    button_step_2_1->Enabled = true;
}
private: System::Void button_step_2_1_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
    e) {
    dataGridView4->RowCount = 5;
    dataGridView5->RowCount = 5;
    dataGridView4->RowHeadersWidth = 140;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        dataGridView4->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i+1) + "]" +
            katalizator[i];
    }
    tabPage4->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage4;
    ввестиДаніЗаЗамовчуваннямToolStripMenuItem->Enabled = false;
    ввестиДаніЗаЗамовчуванням1ToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
/*
Розрахунок. Крок 2.1
*/

```

```

private: System::Void button_calc_1_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b_1, alpha_max_1, CI_1, CR_1;
    array<double, 2>^ arr_kr_1 = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b_1 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_w_1 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod_1 = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView4->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView5->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr_1[i, j] = double::Parse(dataGridView4->Rows[i]
                    ->Cells[j]->Value->ToString());
            }
        }

        //Визначення коефіцієнтів важливості елементів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_b_1[i] = arr_b_1[i] * arr_kr_1[i, j];
            }
            arr_b_1[i] = pow(arr_b_1[i], 0.2);
        }

        //Визначення нормованого значення пріоритетів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            sum_b_1 = sum_b_1 + arr_b_1[i];
        }
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            arr_w_1[i] = arr_b_1[i] / sum_b_1;
            dataGridView5->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w_1[i].ToString("F5");
        }

        //Визначення максимального власного значення матриці
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_dod_1[i] = arr_dod_1[i] + (arr_kr_1[i, j] * arr_w_1[j]);
            }
            alpha_max_1 = alpha_max_1 + arr_dod_1[i];
        }
        textBox_alfa_1->Text = alpha_max_1.ToString("F5");

        //Визначення Індекса погодженості CI
        CI_1 = (alpha_max_1 - 5) / 4;
        textBox_CI_1->Text = CI_1.ToString("F5");

        //Визначення Відношення погодженості CR
        CR_1 = CI_1 / 1.12;
        textBox_CR_1->Text = CR_1.ToString("F5");

        //Виведення результатів
        if ((CR_1 >= 0) && (CR_1 <= 0.1)) {
            button_graph_1->Enabled = true;
            MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_1.
                ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
                можна продовжувати", "Результати. Крок 2.1", MessageBoxButtons::OK,
                MessageBoxIcon::Information);
        }
        else
            MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_1.

```

```

        ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
        виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
        "Результати. Крок 2.1", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
        Error);
    }
    catch (Exception ^ Ситуація)
    {
        MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 2.1",
        MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
    }
}
private: System::Void button_graph_1_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    chart1->Series["Series1"]->Points->Clear();
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        chart1->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
        (dataGridView5->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
    }
    button_step_2_2->Enabled = true;
}
private: System::Void button_step_2_2_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    dataGridView6->RowCount = 5;
    dataGridView7->RowCount = 5;
    dataGridView6->RowHeadersWidth = 140;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        dataGridView6->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i + 1) + "]" +
        katalizator[i];
    }
    tabPage5->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage5;
    ввестиДаніЗаЗамовчуванням1ToolStripMenuItem->Enabled = false;
    ввестиДаніЗаЗамовчуванням2ToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
/*
Розрахунок. Крок 2.2
*/
private: System::Void button_calc_2_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b_2, alpha_max_2, CI_2, CR_2;
    array<double, 2>^ arr_kr_2 = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b_2 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_w_2 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod_2 = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView6->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView7->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr_2[i, j] = double::Parse(dataGridView6->Rows[i]
                ->Cells[j]->Value->ToString());
            }
        }

        //Визначення коефіцієнтів важливості елементів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_b_2[i] = arr_b_2[i] * arr_kr_2[i, j];
            }
            arr_b_2[i] = pow(arr_b_2[i], 0.2);
        }
    }
}

```

```

//Визначення нормованого значення пріоритетів
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    sum_b_2 = sum_b_2 + arr_b_2[i];
}
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    arr_w_2[i] = arr_b_2[i] / sum_b_2;
    dataGridView7->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w_2[i].ToString("F5");
}

//Визначення максимального власного значення матриці
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    for (int j = 0; j < 5; j++) {
        arr_dod_2[i] = arr_dod_2[i] + (arr_kr_2[i, j] * arr_w_2[j]);
    }
    alpha_max_2 = alpha_max_2 + arr_dod_2[i];
}
textBox_alfa_2->Text = alpha_max_2.ToString("F5");

//Визначення Індекса погодженості CI
CI_2 = (alpha_max_2 - 5) / 4;
textBox_CI_2->Text = CI_2.ToString("F5");

//Визначення Відношення погодженості CR
CR_2 = CI_2 / 1.12;
textBox_CR_2->Text = CR_2.ToString("F5");

//Виведення результатів
if ((CR_2 >= 0) && (CR_2 <= 0.1)) {
    button_graph_2->Enabled = true;
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_2.
ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
можна продовжувати", "Результати. Крок 2.2", MessageBoxButtons::OK,
MessageBoxIcon::Information);
}
else
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_2.
ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
"Результати. Крок 2.2", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
Error);
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 2.2",
    MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_graph_2_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    chart2->Series["Series1"]->Points->Clear();
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        chart2->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
(dataGridView7->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
    }
    button_step_2_3->Enabled = true;
}
private: System::Void button_step_2_3_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    dataGridView8->RowCount = 5;
    dataGridView9->RowCount = 5;
    dataGridView8->RowHeadersWidth = 140;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        dataGridView8->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i + 1) + "]" +

```

```

        katalizator[i];
    }
    tabPage6->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage6;
    ввестиДаниЗаЗамовчуванням2ToolStripMenuItem->Enabled = false;
    ввестиДаниЗаЗамовчуванням3ToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
/*
Розрахунок. Крок 2.3
*/
private: System::Void button_calc_3_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b_3, alpha_max_3, CI_3, CR_3;
    array<double, 2>^ arr_kr_3 = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b_3 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_w_3 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod_3 = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView8->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView9->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr_3[i, j] = double::Parse(dataGridView8->Rows[i]
                    ->Cells[j]->Value->ToString());
            }
        }

        //Визначення коефіцієнтів важливості елементів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_b_3[i] = arr_b_3[i] * arr_kr_3[i, j];
            }
            arr_b_3[i] = pow(arr_b_3[i], 0.2);
        }

        //Визначення нормованого значення пріоритетів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            sum_b_3 = sum_b_3 + arr_b_3[i];
        }
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            arr_w_3[i] = arr_b_3[i] / sum_b_3;
            dataGridView9->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w_3[i].ToString("F5");
        }

        //Визначення максимального власного значення матриці
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_dod_3[i] = arr_dod_3[i] + (arr_kr_3[i, j] * arr_w_3[j]);
            }
            alpha_max_3 = alpha_max_3 + arr_dod_3[i];
        }
        textBox_alfa_3->Text = alpha_max_3.ToString("F5");

        //Визначення Індекса погодженості CI
        CI_3 = (alpha_max_3 - 5) / 4;
        textBox_CI_3->Text = CI_3.ToString("F5");

        //Визначення Відношення погодженості CR
        CR_3 = CI_3 / 1.12;
        textBox_CR_3->Text = CR_3.ToString("F5");
    }
}

```

```

//Виведення результатів
if ((CR_3 >= 0) && (CR_3 <= 0.1)) {
    button_graph_3->Enabled = true;
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_3.
ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
можна продовжувати", "Результати. Крок 2.3", MessageBoxButton::OK,
MessageBoxIcon::Information);
}
else
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_3.
ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
"Результати. Крок 2.3", MessageBoxButton::OK, MessageBoxIcon::
Error);
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 2.3",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_graph_3_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
chart3->Series["Series1"]->Points->Clear();
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    chart3->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
(dataGridView9->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
}
button_step_2_4->Enabled = true;
}
private: System::Void button_step_2_4_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
dataGridView10->RowCount = 5;
dataGridView11->RowCount = 5;
dataGridView10->RowHeadersWidth = 140;
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    dataGridView10->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i + 1) + "]" +
katalizator[i];
}
tabPage7->Parent = tabControl1;
tabControl1->SelectedTab = tabPage7;
ввестиДаніЗаЗамовчуванням3ToolStripMenuItem->Enabled = false;
ввестиДаніЗаЗамовчуванням4ToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
/*
Розрахунок. Крок 2.4
*/
private: System::Void button_calc_4_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b_4, alpha_max_4, CI_4, CR_4;
    array<double, 2>^ arr_kr_4 = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b_4 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_w_4 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod_4 = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView10->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView11->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr_4[i, j] = double::Parse(dataGridView10->Rows[i]
->Cells[j]->Value->ToString());
            }
        }
    }
}

```

```

    }
}

//Визначення коефіцієнтів важливості елементів
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    for (int j = 0; j < 5; j++) {
        arr_b_4[i] = arr_b_4[i] * arr_kr_4[i, j];
    }
    arr_b_4[i] = pow(arr_b_4[i], 0.2);
}

//Визначення нормованого значення пріоритетів
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    sum_b_4 = sum_b_4 + arr_b_4[i];
}
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    arr_w_4[i] = arr_b_4[i] / sum_b_4;
    dataGridView11->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w_4[i].ToString("F5");
}

//Визначення максимального власного значення матриці
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    for (int j = 0; j < 5; j++) {
        arr_dod_4[i] = arr_dod_4[i] + (arr_kr_4[i, j] * arr_w_4[j]);
    }
    alpha_max_4 = alpha_max_4 + arr_dod_4[i];
}
textBox_alfa_4->Text = alpha_max_4.ToString("F5");

//Визначення Індекса погодженості CI
CI_4 = (alpha_max_4 - 5) / 4;
textBox_CI_4->Text = CI_4.ToString("F5");

//Визначення Відношення погодженості CR
CR_4 = CI_4 / 1.12;
textBox_CR_4->Text = CR_4.ToString("F5");

//Виведення результатів
if ((CR_4 >= 0) && (CR_4 <= 0.1)) {
    button_graph_4->Enabled = true;
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_4.
ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
можна продовжувати", "Результати. Крок 2.4", MessageBoxButtons::OK,
MessageBoxIcon::Information);
}
else
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_4.
ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
"Результати. Крок 2.4", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
Error);
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 2.4",
    MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_graph_4_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
chart4->Series["Series1"]->Points->Clear();
for (int i = 0; i < 5; i++) {
chart4->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
(dataGridView11->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
}
}

```

```

    }
    button_step_2_5->Enabled = true;
}
private: System::Void button_step_2_5_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    dataGridView12->RowCount = 5;
    dataGridView13->RowCount = 5;
    dataGridView12->RowHeadersWidth = 140;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        dataGridView12->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i + 1) + "]" + " +
        katalizator[i];
    }
    tabPage8->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage8;
    ввестиДаніЗаЗамовчуванням4ToolStripMenuItem->Enabled = false;
    ввестиДаніЗаЗамовчуванням5ToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
/*
Розрахунок. Крок 2.5
*/
private: System::Void button_calc_5_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    double sum_b_5, alpha_max_5, CI_5, CR_5;
    array<double, 2>^ arr_kr_5 = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_b_5 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_w_5 = gcnew array<double>(5) { 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0 };
    array<double>^ arr_dod_5 = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView12->CurrentCell = nullptr;
    dataGridView13->CurrentCell = nullptr;

    try
    {
        //Зчитування даних з комірок
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_kr_5[i, j] = double::Parse(dataGridView12->Rows[i]
                ->Cells[j]->Value->ToString());
            }
        }

        //Визначення коефіцієнтів важливості елементів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_b_5[i] = arr_b_5[i] * arr_kr_5[i, j];
            }
            arr_b_5[i] = pow(arr_b_5[i], 0.2);
        }

        //Визначення нормованого значення пріоритетів
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            sum_b_5 = sum_b_5 + arr_b_5[i];
        }
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            arr_w_5[i] = arr_b_5[i] / sum_b_5;
            dataGridView13->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_w_5[i].ToString("F5");
        }

        //Визначення максимального власного значення матриці
        for (int i = 0; i < 5; i++) {
            for (int j = 0; j < 5; j++) {
                arr_dod_5[i] = arr_dod_5[i] + (arr_kr_5[i, j] * arr_w_5[j]);
            }
            alpha_max_5 = alpha_max_5 + arr_dod_5[i];
        }
    }
}

```

```

textBox_alfa_5->Text = alpha_max_5.ToString("F5");

//Визначення Індекса погодженості CI
CI_5 = (alpha_max_5 - 5) / 4;
textBox_CI_5->Text = CI_5.ToString("F5");

//Визначення Відношення погодженості CR
CR_5 = CI_5 / 1.12;
textBox_CR_5->Text = CR_5.ToString("F5");

//Виведення результатів
if ((CR_5 >= 0) && (CR_5 <= 0.1)) {
    button_graph_5->Enabled = true;
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_5.
ToString("F5") + " <= 0,1, то воно є прийнятним, тому розрахунки
можна продовжувати", "Результати. Крок 2.5", MessageBoxButtons::OK,
MessageBoxIcon::Information);
}
else
    MessageBox::Show("Оскільки відношення узгодженості CR = " + CR_5.
ToString("F5") + " > 0,1, то воно є неприйнятним, тому варто
виправити значення матриці попарних порівнянь і повторити спробу",
"Результати. Крок 2.5", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::
Error);
}
catch (Exception ^ Ситуація)
{
    MessageBox::Show(Ситуація->Message, "Розрахунок. Крок 2.5",
    MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Error);
}
}
private: System::Void button_graph_5_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^
e) {
    chart5->Series["Series1"]->Points->Clear();
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        chart5->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
(dataGridView13->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
    }
    button_result->Enabled = true;
}
private: System::Void button_result_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    dataGridView14->RowCount = 5;
    dataGridView14->RowHeadersWidth = 140;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        dataGridView14->Rows[i]->HeaderCell->Value = "[" + (i + 1) + "]" +
katalizator[i];
    }
    tabPage10->Parent = tabControl1;
    tabControl1->SelectedTab = tabPage10;
    ввестиДаніЗаЗамовчуваннямToolStripMenuItem->Enabled = false;
    розрахуватиГлобальніПріоритетиToolStripMenuItem->Enabled = true;
    побудуватиГрафікГлобальнихПріоритетівToolStripMenuItem->Enabled = true;
    сформуванатиРекомендаціюToolStripMenuItem->Enabled = true;
}
private: System::Void button_calc_result_Click(System::Object^ sender,
System::EventArgs^ e) {
    array<double>^ arr_mu = gcnew array<double>(5);
    array<double, 2>^ arr_v = gcnew array<double, 2>(5, 5);
    array<double>^ arr_priority = gcnew array<double>(5) { 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 };
    dataGridView14->CurrentCell = nullptr;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        arr_mu[i] = double::Parse(dataGridView3->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
    }
}

```

```

arr_v[0, i] = double::Parse(dataGridView5->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
arr_v[1, i] = double::Parse(dataGridView7->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
arr_v[2, i] = double::Parse(dataGridView9->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
arr_v[3, i] = double::Parse(dataGridView11->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
arr_v[4, i] = double::Parse(dataGridView13->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
}
for (int i = 0; i < 5; i++) {
    for (int j = 0; j < 5; j++) {
        arr_priority[i] = arr_priority[i] + (arr_mu[j] * arr_v[j, i]);
    }
    dataGridView14->Rows[i]->Cells[0]->Value = arr_priority[i].ToString("F5");
}
button_graph_result->Enabled = true;
button_recommendation->Enabled = true;
}
private: System::Void button_graph_result_Click(System::Object^ sender, System::
EventArgs^ e) {
    chart6->Series["Series1"]->Points->Clear();
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        chart6->Series["Series1"]->Points->AddXY(katalizator[i], double::Parse
(dataGridView14->Rows[i]->Cells[0]->Value->ToString()));
    }
}
private: System::Void button_recommendation_Click(System::Object^ sender,
System::EventArgs^ e) {
    array<double>^ arr_rez = gcnew array<double>(5);
    double max;
    int num;
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        arr_rez[i] = double::Parse(dataGridView14->Rows[i]->Cells[0]->Value
->ToString());
    }
    for (int i = 0; i < 5; i++) {
        if (arr_rez[i] > max) {
            max = arr_rez[i];
            num = i + 1;
        }
    }
    richTextBox_result->AppendText("Під час вирішення задачі підбору оптимального
каталізатора процесу окислювальної конденсації метану було розглянуто 5
каталізаторів за наступними критеріями: 'Температура', 'Конверсія CH4',
'Селективність C2-вуглеводнів', 'Вихід C2-вуглеводнів' та 'Швидкість реакції.'" +
"\r\n" + "\r\n" + "За результатами розрахунків визначено, що найкращою є
Альтернатива №" + num.ToString() + " (" + katalizator[num-1] + ") з ваговим
коефіцієнтом рівним " + max.ToString() + ".");
}
private: System::Void button_close_Click(System::Object^ sender, System::EventArgs^ e)
{
    Close();
}
private: System::Void button_tutorial_SUBD_Click(System::Object^ sender,
System::EventArgs^ e) {
    MessageBox::Show("1. Для заповнення таблиці каталізаторів натисніть клавішу
'Імпорт записів із бази даних'." + "\r\n" + "2. Для редагування існуючих записів
зробіть виправлення у таблиці та натисніть клавішу 'Оновити записи у базі даних'."
+ "\r\n" + "3. Для додавання запису до БД натисніть клавішу 'Додати запис до бази
даних' та заповніть впливаючі вікна." + "\r\n" + "4. Для видалення записів із БД
натисніть клавішу 'Видалити записи з бази даних' та заповніть впливаючі вікна." +
"\r\n" + "5. Для вибору записів із БД натисніть клавішу 'Вибрати записи з бази

```

```

даних' та заповніть вспливаючі вікна." + "\r\n" + "6. Для очищення таблиці
натисніть клавішу 'Очистити таблицю'." + "\r\n" + "\r\n" + "Примітка." + "\r\n" +
"* До вспливаючих вікон дробові числа необхідно вводити через крапку." + "\r\n" +
"* Для того щоб зміни в базі даних відображалися в таблиці необхідно її очистити
та знову імпортувати записи з бази даних", "Інструкція користувача по роботі з
СУБД", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
}
private: System::Void button_tutorial_PROG_Click(System::Object^ sender, System::
EventArgs^ e) {
MessageBox::Show("1. Для початку роботи з програмою натисніть клавішу 'Почати
роботу'." + "\r\n" + "2. На вкладці 'Крок 1' введіть альтернативи A1-A5 у
відповідні поля." + "\r\n" + "3. Заповніть матрицю попарних порівнянь експертними
оцінками." + "\r\n" + "4. Натисніть клавішу 'Розрахувати' для того, щоб отримати
локальні пріоритети." + "\r\n" + "5. Для графічного представлення результатів
натисніть клавішу 'Графічно зобразити'." + "\r\n" + "6. Натисніть клавішу 'Перейти
до наступного кроку'." + "\r\n" + "7. Повторіть пункти 3-6 для Кроків 2.1-2.5." +
"\r\n" + "8. Натисніть клавішу 'Розрахувати' для того, щоб отримати глобальні
пріоритети." + "\r\n" + "9. Для графічного представлення результатів натисніть
клавішу 'Графічно зобразити'." + "\r\n" + "10. Для отримання рекомендації щодо
оптимального каталізатора натисніть клавішу 'Сформувати рекомендацію'." + "\r\n" +
"\r\n" + "Примітка." + "\r\n" + "* Дробові числа необхідно вводити через кому." +
"\r\n" + "* На панелі 'Меню' передбачено клавіші 'Ввести дані за замовчуванням'
для автоматичного заповнення полів.", "Інструкція користувача по роботі з
програмою", MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
}
private: System::Void button_about_program_Click(System::Object^ sender, System::
EventArgs^ e) {
MessageBox::Show("Програма для вибору каталізатора за методом аналізу ієрархій" +
"\r\n" + "\r\n" + "Версія 1.0 beta" + "\r\n" + "\r\n" + "Розробник: Шаган Дмитрій
Володимирович" + "\r\n" + "Науковий керівник: Бугаєва Людмила Миколаївна" + "\r\n"
+ "\r\n" + "Copyright © 2018. All rights reserved.", "Про програму",
MessageBoxButtons::OK, MessageBoxIcon::Information);
}
};
}

```

ДОДАТОК В

Лістинг файлу Data_catalyst.data

Catalyst #1,800,35.9,99.9,59.2,28.9,11.8,?,1.9
Catalyst #1,780,35.8,99.9,59.8,31.1,8.9,?,1.8
Catalyst #1,750,25.2,69.4,59.9,29,10.8,?,1.2
Catalyst #1,730,13.4,38.3,55.7,32.3,11.8,?,0.6
Catalyst #2,800,38.4,99.8,60.4,27.8,11.6,?,2
Catalyst #2,780,37.4,98.4,60.5,30.2,9.1,?,1.9
Catalyst #2,750,27.6,99.5,37.8,55.7,6,?,0.6
Catalyst #2,730,22,96.5,21.6,74,4.1,?,0.3
Catalyst #3,800,30.5,99.9,47.6,43.5,8.7,?,1
Catalyst #3,780,30.3,99.9,41.4,48.8,9.6,?,0.7
Catalyst #3,750,30.7,99.9,43.96,49.4,6.2,?,0.6
Catalyst #3,730,28.7,99.9,44.1,50.7,4.7,?,0.6
Catalyst #4,780,27.4,99.1,67.7,24,8.1,?,1.5
Catalyst #4,750,23.8,99.7,57.7,30.8,11.1,?,1
Catalyst #5,780,27.8,100,69.3,22.5,7.9,?,1.5
Catalyst #5,750,21.5,99.9,55.7,43.7,0,?,0.7
Catalyst #6,780,27.3,83.5,67.2,29.9,2.7,?,1.5
Catalyst #6,750,24.8,76.3,66.4,32,1.2,?,1.2
Catalyst #7,?,22.9,?,50.04,49.96,?,11.46,2.6
Catalyst #7,?,20.68,?,54.06,45.94,?,11.18,2
Catalyst #7,?,4.96,?,45.75,54.25,?,2.27,0.9
Catalyst #7,?,1.94,?,37.32,62.68,?,0.72,0.6
Catalyst #7,?,21,?,53,47,?,11.13,3
Catalyst #7,?,20.28,?,57.31,42.69,?,11.62,2.6
Catalyst #7,?,5.3,?,36.74,63.26,?,1.95,0.9
Catalyst #7,?,3.35,?,25.07,74.93,?,0.84,1.5
Catalyst #7,?,16.04,?,67.07,32.93,?,10.76,3.2
Catalyst #7,?,14.9,?,71.27,28.73,?,10.62,2.7
Catalyst #7,?,10.02,?,57.93,42.07,?,5.79,2.2
Catalyst #7,?,7.4,?,26.96,73.04,?,2,0.7
Catalyst #7,?,12.59,?,67.2,32.8,?,8.46,3.2
Catalyst #7,?,12.58,?,72.83,27.17,?,9.16,2.8
Catalyst #7,?,8.11,?,40.12,59.88,?,3.25,1.2
Catalyst #7,?,6.12,?,27.11,72.89,?,1.66,2.3

ДОДАТОК Г

Лістинг побудови дерева рішень у вигляді правил у середовищі See5

See5 [Release 2.10]

Fri May 04 02:30:48 2018

Options:

Rule-based classifiers
 20 boosting trials
 Do not use global pruning

Class specified by attribute `catalyst'

Read 34 cases (9 attributes) from Data_catalyst.data

```

----- Trial 0: -----
Rules:
Rule 0/1: (6/2, lift 5.3)
  Conversion of CH4 <= 35.9
  Selectivity to C2 > 50.04
  Selectivity to CO > 7.9
  -> class Catalyst #1 [0.625]
Rule 0/2: (18/14, lift 2.1)
  Conversion of CH4 > 21
  -> class Catalyst #2 [0.250]
Rule 0/3: (4, lift 7.1)
  Conversion of CH4 > 27.8
  Selectivity to C2 <= 50.04
  -> class Catalyst #3 [0.833]
Rule 0/4: (4/2, lift 8.5)
  Selectivity to C2 > 50.04
  Selectivity to CO <= 7.9
  -> class Catalyst #5 [0.500]
Rule 0/5: (2, lift 12.8)
  Conversion of O2 <= 83.5
  Selectivity to CO <= 7.9
  -> class Catalyst #6 [0.750]
Rule 0/6: (16/1, lift 1.9)
  Conversion of CH4 <= 21
  -> class Catalyst #7 [0.889]
Default class: Catalyst #7

----- Trial 1: -----
Rules:
Rule 1/1: (4.2/1.6, lift 4.0)
  Conversion of CH4 <= 22.9
  Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.6
  -> class Catalyst #1 [0.585]
Rule 1/2: (3.1/1.6, lift 3.4)
  Conversion of CH4 > 30.7
  -> class Catalyst #1 [0.500]
Rule 1/3: (3.9/0.8, lift 7.6)
  Conversion of CH4 > 22.9
  Selectivity to CO2 > 32.93
  -> class Catalyst #3 [0.699]
Rule 1/4: (6/0.8, lift 5.0)
  Conversion of CH4 > 22.9
  Conversion of CH4 <= 30.7
  Selectivity to CO2 <= 32.93
  Selectivity to CO > 7.9
  -> class Catalyst #4 [0.778]
Rule 1/5: (2.4/0.8, lift 12.8)
  Selectivity to CO2 <= 32.93
  Selectivity to CO <= 7.9
  -> class Catalyst #6 [0.590]
Rule 1/6: (14.4/0.8, lift 2.1)
  Conversion of CH4 <= 22.9
  Ratio of C2H4/C2H6 > 0.6
  -> class Catalyst #7 [0.891]
Default class: Catalyst #7

```

----- Trial 2: -----

Rules:

Rule 2/1: (4.8/1.3, lift 4.7)
 Conversion of O2 <= 83.5
 -> class Catalyst #1 [0.669]

Rule 2/2: (4.4, lift 4.9)
 Conversion of CH4 > 27.4
 Conversion of O2 <= 99.8
 -> class Catalyst #2 [0.843]

Rule 2/3: (5.2/2.7, lift 6.6)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of O2 > 99.8
 -> class Catalyst #3 [0.487]

Rule 2/4: (4.2, lift 6.7)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of CH4 <= 27.4
 Conversion of O2 > 83.5
 -> class Catalyst #4 [0.840]

Rule 2/5: (10.3, lift 2.5)
 Conversion of CH4 <= 22.9
 Ratio of C2H4/C2H6 > 0.7
 -> class Catalyst #7 [0.919]

Rule 2/6: (6.7/1.5, lift 2.0)
 Conversion of CH4 <= 22.9
 Selectivity to C2 <= 45.75
 -> class Catalyst #7 [0.718]

Default class: Catalyst #5

----- Trial 3: -----

Rules:

Rule 3/1: (7.7/1.7, lift 4.1)
 Conversion of CH4 <= 35.9
 Selectivity to C2 <= 60.5
 Selectivity to CO2 <= 32.3
 -> class Catalyst #1 [0.724]

Rule 3/2: (3.6, lift 4.7)
 Conversion of CH4 > 21.5
 Selectivity to CO2 > 50.7
 -> class Catalyst #2 [0.821]

Rule 3/3: (2.3, lift 4.4)
 Conversion of CH4 > 35.9
 -> class Catalyst #2 [0.768]

Rule 3/4: (3.4/1, lift 6.0)
 Selectivity to C2 > 67.7
 -> class Catalyst #5 [0.630]

Rule 3/5: (8.3/5.1, lift 4.3)
 Selectivity to C2 > 60.5
 Selectivity to CO2 <= 32.3
 -> class Catalyst #6 [0.407]

Rule 3/6: (15.6/6.8, lift 1.9)
 Selectivity to CO2 > 32.3
 -> class Catalyst #7 [0.561]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 4: -----

Rules:

Rule 4/1: (4.5/1.9, lift 3.8)
 Conversion of CH4 > 30.7
 -> class Catalyst #1 [0.555]

Rule 4/2: (10.5/7.5, lift 2.2)
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.7
 -> class Catalyst #2 [0.316]

Rule 4/3: (5.1/1, lift 6.0)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Selectivity to CO2 > 32.93
 -> class Catalyst #3 [0.724]

Rule 4/4: (5.4/1, lift 5.6)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of CH4 <= 30.7
 Selectivity to CO2 <= 32.93
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #4 [0.735]

Rule 4/5: (4.6/2, lift 7.1)
 Selectivity to CO2 <= 32.93
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.548]

Rule 4/6: (8, lift 3.3)
 Conversion of CH4 <= 22.9
 Ratio of C2H4/C2H6 > 0.7
 -> class Catalyst #7 [0.900]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 5: -----

Rules:

Rule 5/1: (2.2, lift 4.9)
 Conversion of CH4 > 30.7
 Conversion of CH4 <= 35.9
 -> class Catalyst #1 [0.765]

Rule 5/2: (24.4/18.8, lift 1.5)
 Conversion of CH4 > 21
 -> class Catalyst #2 [0.253]

Rule 5/3: (3.5, lift 7.9)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 <= 50.04
 -> class Catalyst #3 [0.819]

Rule 5/4: (5.1/1.3, lift 6.0)
 Conversion of CH4 > 21
 Conversion of CH4 <= 30.7
 Selectivity to C2 > 50.04
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #4 [0.673]

Rule 5/5: (4.4, lift 6.5)
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 50.04
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.844]

Rule 5/6: (2.2, lift 11.6)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.765]

Rule 5/7: (9.6/1.8, lift 2.9)
 Conversion of CH4 <= 21
 -> class Catalyst #7 [0.761]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 6: -----

Rules:

Rule 6/1: (7.3, lift 3.3)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.893]

Rule 6/2: (3.4/1, lift 4.7)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.6
 -> class Catalyst #2 [0.623]

Rule 6/3: (2.8, lift 9.7)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #3 [0.790]

Rule 6/4: (3.9/0.9, lift 7.7)
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO > 7.9
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 1.8
 -> class Catalyst #4 [0.679]

Rule 6/5: (5.2/1.8, lift 6.0)
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.618]

Rule 6/6: (5.9, lift 3.1)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 > 0.6
 -> class Catalyst #7 [0.873]

Rule 6/7: (9.6/3, lift 2.4)
 Ratio of C2H4/C2H6 > 1.8
 -> class Catalyst #7 [0.658]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 7: -----

Rules:

Rule 7/1: (10.4/1.2, lift 3.0)
 Conversion of CH4 <= 35.9
 Selectivity to C2 <= 60.5
 Selectivity to CO2 <= 32.3
 -> class Catalyst #1 [0.822]

Rule 7/2: (3.6, lift 5.1)
 Conversion of CH4 > 35.9
 -> class Catalyst #2 [0.820]

Rule 7/3: (2.2, lift 11.6)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to CO2 > 32.3
 -> class Catalyst #3 [0.765]

Rule 7/4: (3.8/2.3, lift 5.2)
 Selectivity to C2 > 67.2
 -> class Catalyst #5 [0.429]

Rule 7/5: (3.2, lift 8.5)
 Selectivity to C2 > 60.5
 Selectivity to C2 <= 67.2
 Selectivity to CO2 <= 32.3
 -> class Catalyst #6 [0.809]

Rule 7/6: (10.7/3.2, lift 2.6)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to CO2 > 32.3
 -> class Catalyst #7 [0.666]

Default class: Catalyst #1

----- Trial 8: -----

Rules:

Rule 8/1: (28.1/20.7, lift 1.3)
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 2
 -> class Catalyst #1 [0.281]

Rule 8/2: (2.9, lift 4.3)
 Conversion of CH4 > 35.9
 -> class Catalyst #2 [0.796]

Rule 8/3: (8/4.6, lift 2.4)
 Selectivity to C2 <= 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 2
 -> class Catalyst #2 [0.439]

Rule 8/4: (3.9, lift 7.3)
 Conversion of CH4 <= 30.7
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #4 [0.830]

Rule 8/5: (3.3, lift 8.4)
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.810]

Rule 8/6: (2.6, lift 10.1)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.784]

Rule 8/7: (5.9, lift 3.4)
 Ratio of C2H4/C2H6 > 2
 -> class Catalyst #7 [0.873]

Rule 8/8: (3.1, lift 3.2)
 Conversion of CH4 <= 21
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #7 [0.806]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 9: -----

Rules:

Rule 9/1: (2, lift 4.5)
 Conversion of CH4 > 30.7
 Conversion of O2 > 99.8
 -> class Catalyst #1 [0.751]

Rule 9/2: (5.7/2, lift 3.6)
 Conversion of O2 <= 83.5
 -> class Catalyst #1 [0.609]

Rule 9/3: (2.2, lift 5.4)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Conversion of O2 <= 99.8
 -> class Catalyst #2 [0.763]

Rule 9/4: (3.7/1.1, lift 4.5)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.6
 -> class Catalyst #2 [0.630]

Rule 9/5: (9.4, lift 3.3)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Conversion of CH4 <= 30.7
 -> class Catalyst #3 [0.912]

Rule 9/6: (5.5/2.5, lift 6.1)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 -> class Catalyst #4 [0.531]

Rule 9/7: (20.4/13.8, lift 1.8)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 -> class Catalyst #7 [0.340]

Default class: Catalyst #3

----- Trial 10: -----

Rules:

Rule 10/1: (3, lift 5.9)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO > 6.2
 -> class Catalyst #1 [0.798]

Rule 10/2: (3.4/1.6, lift 4.6)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 > 53
 -> class Catalyst #2 [0.515]

Rule 10/3: (7.5, lift 4.0)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 <= 53
 -> class Catalyst #3 [0.895]

Rule 10/4: (2.4, lift 11.1)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Conversion of O2 > 83.5
 Conversion of O2 <= 99.8
 Selectivity to C2 > 54.06
 -> class Catalyst #4 [0.771]

Rule 10/5: (4.8, lift 6.1)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Conversion of O2 > 99.8
 -> class Catalyst #5 [0.852]

Rule 10/6: (4.3, lift 6.7)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO <= 6.2
 -> class Catalyst #6 [0.841]

Rule 10/7: (23.1/16.5, lift 1.6)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 -> class Catalyst #7 [0.304]

Default class: Catalyst #3

----- Trial 11: -----

Rules:

Rule 11/1: (8.2/0.9, lift 3.8)
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to C2 <= 59.9
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.811]

Rule 11/2: (2.8, lift 4.0)
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.3
 -> class Catalyst #2 [0.791]

Rule 11/3: (2.6, lift 3.9)
 Conversion of CH4 > 25.2
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #2 [0.784]

Rule 11/4: (5.9, lift 5.1)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #3 [0.873]

Rule 11/5: (3.7, lift 7.5)
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.825]

Rule 11/6: (3.3, lift 8.3)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.813]

Rule 11/7: (3.6, lift 5.4)
 Conversion of CH4 <= 25.2
 Selectivity to C2 <= 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 > 0.3
 -> class Catalyst #7 [0.821]

Default class: Catalyst #2

----- Trial 12: -----

Rules:

Rule 12/1: (4.9/1.1, lift 4.2)
Conversion of CH4 > 30.7
-> class Catalyst #1 [0.700]

Rule 12/2: (6.1/1.9, lift 4.2)
Conversion of CH4 <= 27.8
Selectivity to C2 <= 54.06
Ratio of C2H4/C2H6 <= 2
-> class Catalyst #2 [0.646]

Rule 12/3: (4.6, lift 6.3)
Conversion of CH4 > 27.8
Selectivity to C2 <= 54.06
-> class Catalyst #3 [0.848]

Rule 12/4: (5.3/1.8, lift 5.9)
Conversion of CH4 <= 30.7
Selectivity to C2 > 54.06
Selectivity to CO > 7.9
-> class Catalyst #4 [0.619]

Rule 12/5: (5.5/2.6, lift 6.1)
Selectivity to C2 > 54.06
Selectivity to CO <= 7.9
-> class Catalyst #5 [0.520]

Rule 12/6: (7.6, lift 3.2)
Ratio of C2H4/C2H6 > 2
-> class Catalyst #7 [0.896]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 13: -----

Rules:

Rule 13/1: (22.1/16.4, lift 1.7)
Selectivity to C2 > 50.04
-> class Catalyst #1 [0.277]

Rule 13/2: (4.1/0.7, lift 4.7)
Conversion of CH4 > 21
Conversion of CH4 <= 27.8
Selectivity to C2 <= 50.04
-> class Catalyst #2 [0.728]

Rule 13/3: (3.7, lift 7.5)
Conversion of CH4 > 27.8
Selectivity to C2 <= 50.04
-> class Catalyst #3 [0.826]

Rule 13/4: (4.1/1.2, lift 7.5)
Conversion of CH4 > 21
Conversion of CH4 <= 30.7
Selectivity to C2 > 50.04
Selectivity to CO > 7.9
-> class Catalyst #4 [0.638]

Rule 13/5: (5.7/2.4, lift 5.7)
Selectivity to C2 > 50.04
Selectivity to CO <= 7.9
-> class Catalyst #6 [0.563]

Rule 13/6: (11.4/1.3, lift 2.6)
Conversion of CH4 <= 21
-> class Catalyst #7 [0.826]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 14: -----

Rules:

Rule 14/1: (7.7/1.2, lift 4.1)
 Conversion of CH4 <= 35.9
 Selectivity to C2 <= 60.5
 Selectivity to CO2 <= 32.93
 -> class Catalyst #1 [0.774]

Rule 14/2: (3.2, lift 4.6)
 Conversion of CH4 > 35.9
 -> class Catalyst #2 [0.807]

Rule 14/3: (4.4/1.4, lift 7.0)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Selectivity to CO2 > 32.93
 -> class Catalyst #3 [0.632]

Rule 14/4: (2.9/1.2, lift 5.0)
 Selectivity to C2 > 60.5
 Selectivity to CO > 2.7
 -> class Catalyst #5 [0.554]

Rule 14/5: (2.7, lift 9.8)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Selectivity to CO <= 2.7
 -> class Catalyst #6 [0.789]

Rule 14/6: (15.1/5.5, lift 2.2)
 Conversion of CH4 <= 22.9
 -> class Catalyst #7 [0.620]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 15: -----

Rules:

Rule 15/1: (2.1, lift 4.9)
 Conversion of CH4 > 30.7
 Conversion of O2 > 99.8
 -> class Catalyst #1 [0.757]

Rule 15/2: (5, lift 3.9)
 Conversion of CH4 > 27.4
 Conversion of O2 <= 99.8
 -> class Catalyst #2 [0.856]

Rule 15/3: (2.4, lift 3.6)
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.3
 -> class Catalyst #2 [0.774]

Rule 15/4: (6/3.5, lift 5.9)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of O2 > 99.8
 -> class Catalyst #3 [0.437]

Rule 15/5: (4.3, lift 6.6)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of CH4 <= 27.4
 Conversion of O2 > 83.5
 -> class Catalyst #4 [0.842]

Rule 15/6: (3, lift 6.2)
 Conversion of CH4 > 16.04
 Conversion of CH4 <= 22.9
 Ratio of C2H4/C2H6 > 0.3
 Ratio of C2H4/C2H6 <= 0.7
 -> class Catalyst #5 [0.800]

Rule 15/7: (3.8/1.6, lift 8.5)
 Conversion of CH4 > 22.9
 Conversion of O2 <= 83.5
 -> class Catalyst #6 [0.559]

Rule 15/8: (14.9/7.1, lift 2.3)
 Conversion of CH4 <= 22.9
 -> class Catalyst #7 [0.522]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 16: -----

Rules:

Rule 16/1: (7.3, lift 3.4)
 Conversion of O2 \leq 83.5
 Selectivity to CO $>$ 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.893]

Rule 16/2: (9/5.3, lift 2.5)
 Selectivity to C2 \leq 54.06
 -> class Catalyst #2 [0.432]

Rule 16/3: (4.3/0.8, lift 7.0)
 Conversion of O2 $>$ 83.5
 Selectivity to C2 $>$ 54.06
 Selectivity to CO $>$ 7.9
 Ratio of C2H4/C2H6 \leq 1.8
 -> class Catalyst #4 [0.707]

Rule 16/4: (7.6/1.8, lift 4.1)
 Selectivity to C2 $>$ 54.06
 Selectivity to CO \leq 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.712]

Rule 16/5: (6.9/2.9, lift 3.1)
 Ratio of C2H4/C2H6 $>$ 1.8
 -> class Catalyst #7 [0.565]

Default class: Catalyst #1

----- Trial 17: -----

Rules:

Rule 17/1: (6.2, lift 3.6)
 Conversion of O2 \leq 83.5
 Selectivity to CO $>$ 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.878]

Rule 17/2: (2.5, lift 4.6)
 Conversion of CH4 $>$ 35.9
 -> class Catalyst #2 [0.779]

Rule 17/3: (4.3/1.1, lift 3.9)
 Conversion of CH4 \leq 27.8
 Selectivity to C2 \leq 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 \leq 0.6
 -> class Catalyst #2 [0.661]

Rule 17/4: (2.9, lift 9.3)
 Conversion of CH4 $>$ 27.8
 Selectivity to C2 \leq 54.06
 -> class Catalyst #3 [0.796]

Rule 17/5: (4/1.1, lift 7.7)
 Conversion of O2 $>$ 83.5
 Selectivity to C2 $>$ 54.06
 Selectivity to CO $>$ 7.9
 Ratio of C2H4/C2H6 \leq 1.8
 -> class Catalyst #4 [0.654]

Rule 17/6: (5, lift 5.9)
 Conversion of O2 $>$ 83.5
 Selectivity to C2 $>$ 54.06
 Selectivity to CO \leq 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.856]

Rule 17/7: (2.2, lift 11.6)
 Conversion of O2 \leq 83.5
 Selectivity to CO \leq 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.764]

Rule 17/8: (3.4, lift 4.0)
 Conversion of CH4 \leq 27.8
 Selectivity to C2 \leq 54.06
 Ratio of C2H4/C2H6 $>$ 0.6
 -> class Catalyst #7 [0.813]

Rule 17/9: (4.5/1.1, lift 3.3)
 Conversion of CH4 \leq 35.9
 Ratio of C2H4/C2H6 $>$ 1.8
 -> class Catalyst #7 [0.682]

Default class: Catalyst #1

----- Trial 18: -----

Rules:

Rule 18/1: (12.7/1.1, lift 2.5)
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to C2 <= 59.9
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.855]

Rule 18/2: (3.1/1.1, lift 4.5)
 Selectivity to C2 > 59.9
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #2 [0.582]

Rule 18/3: (5.3/2.8, lift 3.6)
 Conversion of CH4 > 21.5
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #2 [0.476]

Rule 18/4: (5.6/1.7, lift 5.6)
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.639]

Rule 18/5: (5.5, lift 3.7)
 Conversion of CH4 <= 21.5
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #7 [0.866]

Default class: Catalyst #7

----- Trial 19: -----

Rules:

Rule 19/1: (11.1/1.7, lift 2.9)
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to C2 <= 59.9
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #1 [0.794]

Rule 19/2: (4.5, lift 6.4)
 Conversion of CH4 > 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #3 [0.847]

Rule 19/3: (3.3/1.6, lift 5.1)
 Selectivity to C2 > 59.9
 Selectivity to CO > 7.9
 -> class Catalyst #4 [0.510]

Rule 19/4: (3.1, lift 8.8)
 Conversion of O2 > 83.5
 Selectivity to C2 > 54.06
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #5 [0.805]

Rule 19/5: (2.9, lift 9.4)
 Conversion of O2 <= 83.5
 Selectivity to CO <= 7.9
 -> class Catalyst #6 [0.794]

Rule 19/6: (7.6/2, lift 3.3)
 Conversion of CH4 <= 27.8
 Selectivity to C2 <= 54.06
 -> class Catalyst #7 [0.686]

Default class: Catalyst #7

Evaluation on training data (34 cases):

Trial	Rules	
	No	Errors
0	6	4 (11.8%)
1	6	8 (23.5%)
2	6	6 (17.6%)
3	6	9 (26.5%)
4	6	9 (26.5%)
5	7	3 (8.8%)
6	7	7 (20.6%)
7	6	7 (20.6%)
8	8	4 (11.8%)
9	7	5 (14.7%)
10	7	4 (11.8%)
11	7	8 (23.5%)
12	6	13 (38.2%)
13	6	7 (20.6%)
14	6	5 (14.7%)
15	8	3 (8.8%)
16	5	16 (47.1%)
17	9	3 (8.8%)
18	5	9 (26.5%)
19	6	5 (14.7%)
boost		0 (0.0%) <<

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	<-classified as
4							(a): class Catalyst #1
	4						(b): class Catalyst #2
		4					(c): class Catalyst #3
			2				(d): class Catalyst #4
				2			(e): class Catalyst #5
					2		(f): class Catalyst #6
						16	(g): class Catalyst #7

Attribute usage:

100% Conversion of CH4
 100% Selectivity to C2
 100% Ratio of C2H4/C2H6
 94% Selectivity to CO2
 50% Conversion of O2
 35% Selectivity to CO

Time: 0.3 secs