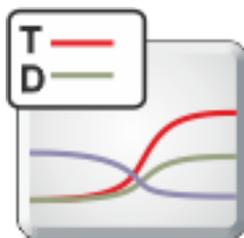




РФЯЦ-ВНИИТФ

РОСАТОМ

Программное средство
для термодинамического моделирования
многокомпонентных многофазных систем.
Версия 2.0



TeDy 2.0

Руководство пользователя

Пешкичев И.В., Шульц О.В., Паукова А.Е., Пугачев В.Ю., Макеева И.Р.

Программное средство для термодинамического моделирования многокомпонентных многофазных систем. Версия 2.0: TeDu 2.0 Руководство пользователя – Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2021. — 33 с.: ил.

В документе приведено описание программного средства TeDu, который разрабатывается в ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина» и предназначен для решения задач термодинамического моделирования многокомпонентных многофазных систем, исследования и оценки поведения физико-химических систем на основе данных о химически равновесных составах. Документ содержит описание интерфейса пользователя, описание модулей работы с базой данных, расчета равновесия, оценки свойств и расчета изменения термодинамических функций по реакциям.

Краткое описание предназначено для студентов, аспирантов и преподавателей направлений химическая технология, химическая наука, металлургия и материаловедение; научных и инженерных работников, специализирующихся в области химических технологий, участвующих в разработке, оптимизации и модернизации технологий; экспертов-аналитиков, оценивающих реализуемость, применимость, эффективность конкретных технических решений.

Оглавление

| | |
|--|----|
| ВВЕДЕНИЕ..... | 5 |
| 1 Требования к аппаратным и программным средствам..... | 6 |
| 1.1 Пакет поставки | 6 |
| 1.2 Минимальные и рекомендуемые аппаратные требования..... | 6 |
| 1.3 Системные требования | 6 |
| 2 Установка и запуск программного средства | 6 |
| 3 Основной интерфейс..... | 7 |
| 4 Настройка программного средства..... | 8 |
| 4.1 Конфигурация | 8 |
| 4.2 Информация о подключенных модулях..... | 9 |
| 4.3 Настройки пользователя | 10 |
| 5 Работа с базой данных | 11 |
| 5.1 Назначение модуля..... | 11 |
| 5.2 Поиск с использованием фильтров..... | 12 |
| 5.3 Просмотр данных | 13 |
| 5.4 Экспорт данных | 13 |
| 5.5 Построение графиков..... | 14 |
| 6 Расчёт равновесия | 16 |
| 6.1 Назначение модуля..... | 16 |
| 6.2 Загрузка варианта расчета | 16 |
| 6.3 Создание нового варианта | 16 |
| 6.4 Постановка задачи..... | 22 |
| 6.5 Экстраполяция данных | 24 |
| 6.6 Сохранение варианта | 25 |
| 6.7 Настройка расчетной стратегии и запуск расчета..... | 26 |
| 6.8 Результаты расчета..... | 27 |
| 7 Оценка свойств..... | 29 |
| 7.1 Назначение модуля..... | 29 |
| 7.2 Постановка задачи..... | 30 |
| 7.3 Результаты расчета..... | 30 |
| 8 Расчет реакций | 31 |
| 8.1 Назначение модуля..... | 31 |
| 8.2 Постановка задачи..... | 31 |

| | |
|--|----|
| 8.3 Результаты расчета..... | 31 |
| Список использованных источников | 33 |

ВВЕДЕНИЕ

Настоящее краткое описание предназначено для пользователя программного средства (ПС) TeDu [1], нацеленного на решение задач термодинамического моделирования многокомпонентных многофазных систем, исследования и оценки поведения физико-химических систем на основе данных о химически равновесных составах.

Программное средство обеспечивает расчет химически равновесного состава в многокомпонентных многофазных системах, расчет изменения термодинамических функций отдельных химических реакций, оценку значений термодинамических функций химических соединений (энтальпии образования, энтропии и изобарной теплоемкости) по их структуре и доступ к базе термодинамических данных. В основе функции расчета равновесия лежит стехиометрический метод расчета суммарной энергии Гиббса системы в зависимости от координат реакций. Координаты минимума рассчитываются одним из численных методов оптимизации. На основе значений координат реакций, соответствующих минимуму энергии Гиббса, определяется равновесный вещественный состав. Для оценки свойств различных соединений по данным об их структуре и агрегатном состоянии используется математическая модель на основе принципов QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship). База данных программного средства обеспечивает хранение, просмотр и извлечение данных о термодинамических свойствах веществ и других данных, необходимых для расчетов.

Программное средство имеет модульную архитектуру. В текущей версии реализованы следующие модули:

1. Работа с базой данных;
2. Расчёт равновесия;
3. Оценка свойств;
4. Расчёт реакций.

ПС TeDu нацелен на применение при проектировании и оптимизации широкого спектра технологических процессов, проведение исследований и оценки поведения различных физико-химических систем. Программное средство успешно применяется при выполнении работ по моделированию ключевых технологических процессов замкнутого ядерного топливного цикла.

1 Требования к аппаратным и программным средствам

1.1 Пакет поставки

На CD-диске с ПС TeDu находятся:

- исполняемые файлы программного средства;
- файлы тестовых расчётных вариантов;
- дистрибутивы системных компонент ОС Windows, требуемых для работы расчётного кода;
- данное краткое описание.

1.2 Минимальные и рекомендуемые аппаратные требования

Для стабильной и комфортной работы пользователя с ПС TeDu компьютер должен соответствовать аппаратным требованиям, представленным в таблице 1.

Таблица 1 – Аппаратные требования

| <i>Компонент</i> | <i>Минимальное требование</i> | <i>Рекомендуемое требование</i> |
|---------------------|-------------------------------|---------------------------------|
| Процессор | Intel Core 2 Duo, 2 GHz | Intel Core i5, 3.3 GHz |
| Оперативная память | 4 гигабайт | 8 гигабайт |
| Жесткий диск | 120 гигабайт | 500 гигабайт |
| Диагональ монитора | 19 дюймов | 24 дюйма |
| Разрешение монитора | 1680x1050 | 1920x1080 |

1.3 Системные требования

ПС TeDu может работать под управлением операционных систем Microsoft Windows 7 (рекомендуется), 8 и 10.

Для обеспечения отображения результатов расчёта в формате офисных документов Word и Excel требуется наличие пакета Microsoft Office не ниже 2010 версии¹.

2 Установка и запуск программного средства

Если Microsoft .NET Framework 4.0 не установлен или установлен не полностью — требуется установить дистрибутив «dotNetFx40_Full_x86_x64.exe» из каталога INSTALL с правами администратора.

Для установки ПС TeDu на компьютер необходимо запустить инсталляционный пакет и последовательно выполнить инструкции установщика, включая принятие лицензионного

¹ Установка программных компонент для поддержки баз данных SQLite не требуется, так как провайдеры данных СУБД SQLite интегрированы в состав ПС TeDu.

соглашения. После успешного завершения установки на рабочем столе появится ярлык для запуска кода с именем «TeDu».

Запуск программного средства TeDu осуществляется стандартным образом с помощью исполняемого файла *TeDu.exe*. При этом на экран выводится главное окно программного средства.

3 Основной интерфейс

Доступ к основным функциям TeDu возможен через специально разработанный программный интерфейс.

Главное окно программного средства TeDu показано на рисунке 1.

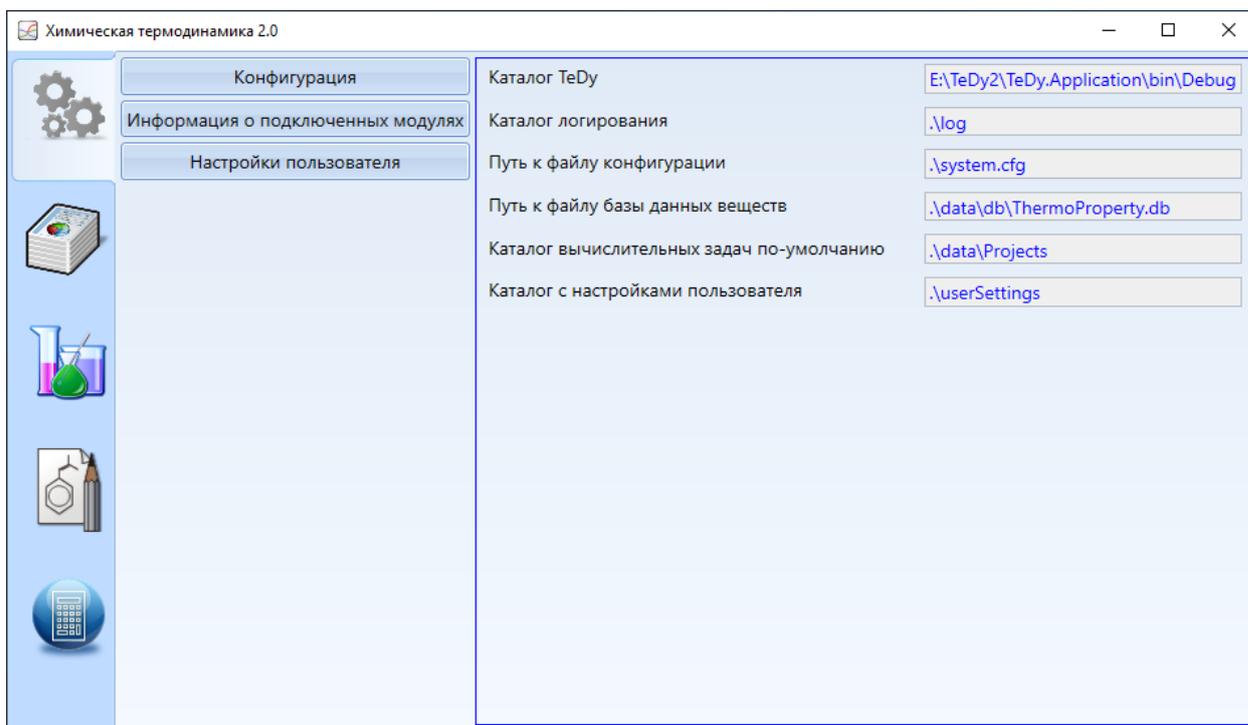


Рисунок 1 – Главное окно программного средства TeDu. Вид по умолчанию

В главном окне по умолчанию отображается страница с общими параметрами программы (Настройки). Главное окно содержит панель для переключения между модулями:



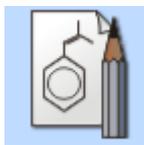
– вывод на экран окна «Настройки программного средства» (описание приведено в разделе 4);



– вывод на экран окна «Работа с базой данных» (описание приведено в разделе 5);



б); – вывод на экран окна «Расчёт равновесия» (описание приведено в разделе



– вывод на экран окна «Оценка свойств» (описание приведено в разделе 7);



– вывод на экран окна «Расчет реакций» (описание приведено в разделе 8);

Для переключения между модулями необходимо нажать на значок соответствующего модуля на панели слева.

4 Настройка программного средства

На стартовой странице программы пользователь при необходимости осуществляет основные настройки, разделенные на следующие вкладки:

- Конфигурация;
- Информация о подключенных модулях;
- Настройки пользователя.

4.1 Конфигурация

На вкладке «Конфигурация» указаны пути к основным каталогам TeDu, как показано на рисунке 2:

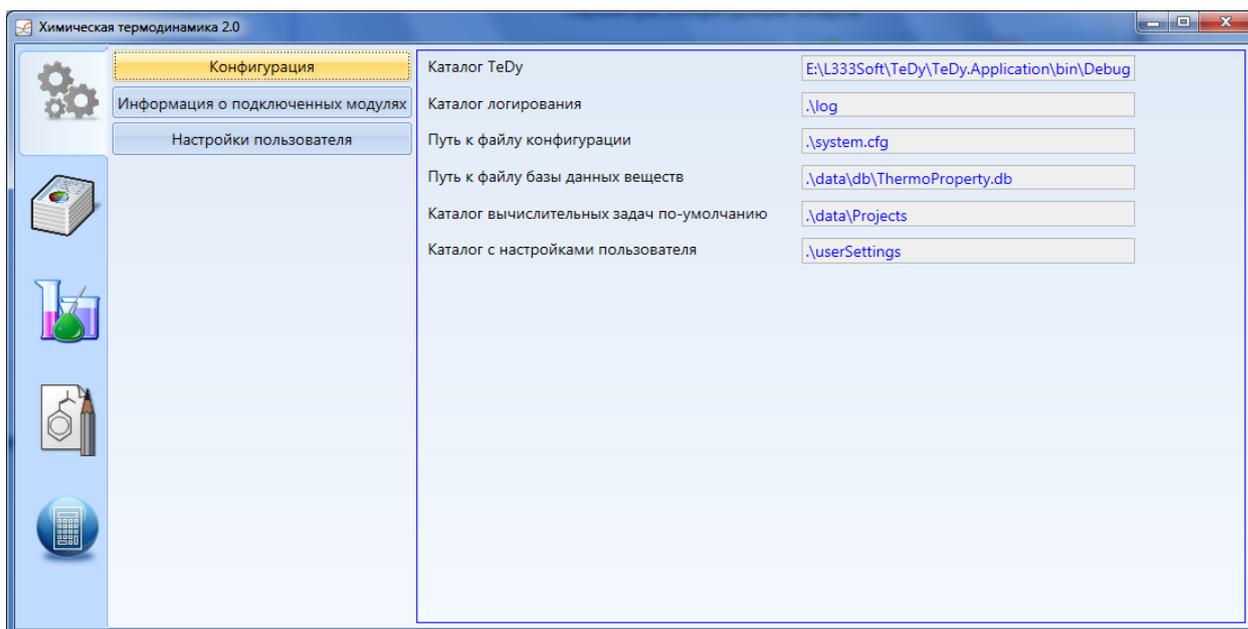


Рисунок 2 – Настройка программного средства. Вкладка «Конфигурация»

1. Каталог TeDu – каталог, в котором расположен основной исполняемый файл TeDu.exe;
2. Каталог логирования – каталог, в котором сохраняются .log-файлы с записями о событиях, возникающих при работе программы. Во время работы программного средства TeDu отслеживается возникновение различных событий, таких как загрузка модулей, создание элементов пользовательского интерфейса, загрузка и освобождение памяти, ошибки при задании или загрузке данных и другие. Все отслеживаемые события записываются в log-файлы трёх типов:
 - основной – main.log;
 - отслеживание памяти – memory.log;
 - ошибки – err.log;
3. Путь к файлу конфигурации – расположение файла с общими настройками программного средства;
4. Путь к файлу базы данных веществ – расположение файла ThermoProperty.db, содержащего базу данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ;
5. Каталог вычислительных задач по умолчанию – каталог, в котором хранятся все данные программных модулей отдельных задач;
6. Каталог с настройками пользователя – каталог с файлом пользовательских настроек.

4.2 Информация о подключенных модулях

Программное средство имеет модульную архитектуру. Это означает возможность подключения/отключения модулей, решающих различные задачи.

На вкладке «Информация о подключенных модулях» приведён список доступных в данной версии программных модулей TeDu, как показано на рисунке 3.

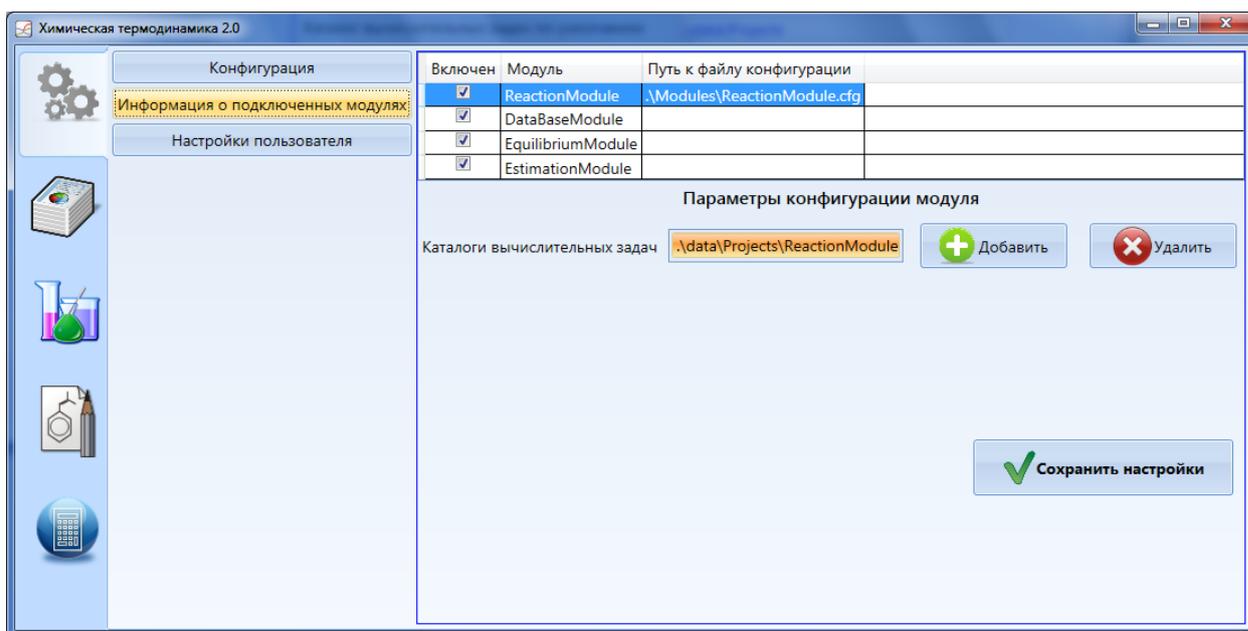


Рисунок 3 – Настройки программного средства. Вкладка «Информация о подключенных модулях»

Для отключения модуля следует снять, а для включения – установить галочку рядом с его названием в столбце таблицы «Включен».

4.3 Настройки пользователя

На вкладке «Настройки пользователя» доступен выбор темы визуального оформления пользовательского интерфейса, как показано на рисунке 4.

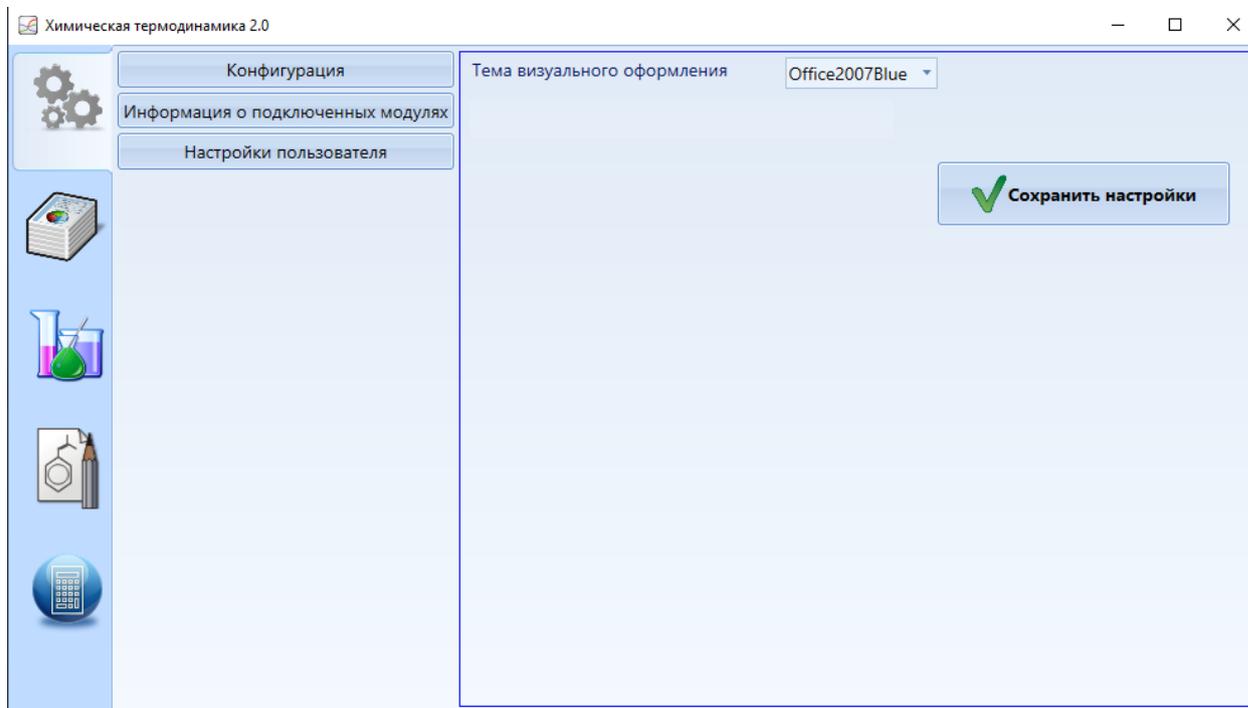


Рисунок 4 – Настройки программного средства. Вкладка «Настройки пользователя»

Выбор темы осуществляется из предложенных в раскрывающемся списке. Применение выбранной темы происходит автоматически. Для сохранения настроек необходимо нажать на кнопку «Сохранить настройки».

5 Работа с базой данных

5.1 Назначение модуля

В состав программы включена база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ. База включает информацию из источников [2, 3].

Модуль «Работа с базой данных» позволяет искать, просматривать экспортировать данные, а также строить графики. Найти интересующее вещество можно как непосредственно прокручивая общую таблицу (рисунок 5), так и с помощью фильтров (рисунок 6).



The screenshot shows the 'Химическая термодинамика 2.0' application window. The 'База данных' (Database) tab is active, displaying a table with three columns: 'Хим. формула' (Chemical formula), 'Вещество' (Substance), and 'Вещество рус.' (Substance Russian). The table lists various chemical compounds with their respective names in English and Russian. A 'Export to Excel' button is visible in the bottom right corner of the table area.

| | Хим. формула | Вещество | Вещество рус. |
|---|--------------|------------------------------|---------------------------------|
| + | C | Carbon | Углерод |
| + | CBr | Bromomethylidyne | Углерода бромид |
| + | HNO3 | Nitric Acid | Азотная кислота |
| + | C2 | Carbon2 | Диуглерод |
| + | C3 | Carbon3 | Триуглерод |
| + | CCN | Carbon Carbide-Nitride | Углерода карбонитрид |
| + | CCl | Chloromethylidyne | Углерода хлорид |
| + | CCl2 | Dichloromethylene | Углерода дихлорид |
| + | CCl3 | Trichloromethyl | Углерода трихлорид трихлорид |
| + | CCl4 | Tetrachloromethane | Углерода тетрахлорид |
| + | Ir2S3 | Diiridium Trisulfide | Дииридия трисульфид |
| + | C2Cl | Dicarbon Chloride | Диуглерода хлорид |
| + | C2Cl2 | Dichloroacetylene | Дихлорацетилен |
| + | C2Cl3 | Dicarbon Trichloride | Диуглерода трихлорид |
| + | C2Cl4 | Tetrachloroethene | Тетрахлорэтилен |
| + | C2Cl5 | Pentachloroethyl | Пентахлорэтил |
| + | C2Cl6 | Hexachloroethane | Гексахлорэтан |
| + | CH4 | Methane | Метан |
| + | CN | Cyanogen | Циан |
| + | CN2 | Carbon Nitride (NCN Radical) | Углерода динитрид (NCN радикал) |
| + | C2N2 | Ethanedinitrile | Дициан |
| + | CNC | Nitrogen Dicarbide | Азота дикарбид |

Рисунок 5 – Вид окна модуля «Работа с базой данных». Общая таблица

5.2 Поиск с использованием фильтров

Для использования фильтров следует щелкнуть по значку  в заголовке нужного столбца (если требуется поиск по формуле – следует щелкнуть по значку  в столбце «Хим. Формула», если по англоязычному названию вещества, то в столбце «Вещество», если по русскоязычному – «Вещество рус.»). Далее в выпадающем меню можно выбрать один из вариантов:

- сортировка в алфавитном порядке;
- сортировка в обратном алфавитном порядке;
- сброс фильтров
- текстовый фильтр
- текстовый поиск

При выборе одного из вариантов текстового фильтра на экране отобразится окно, позволяющее задать дополнительное условие для текстового фильтра.

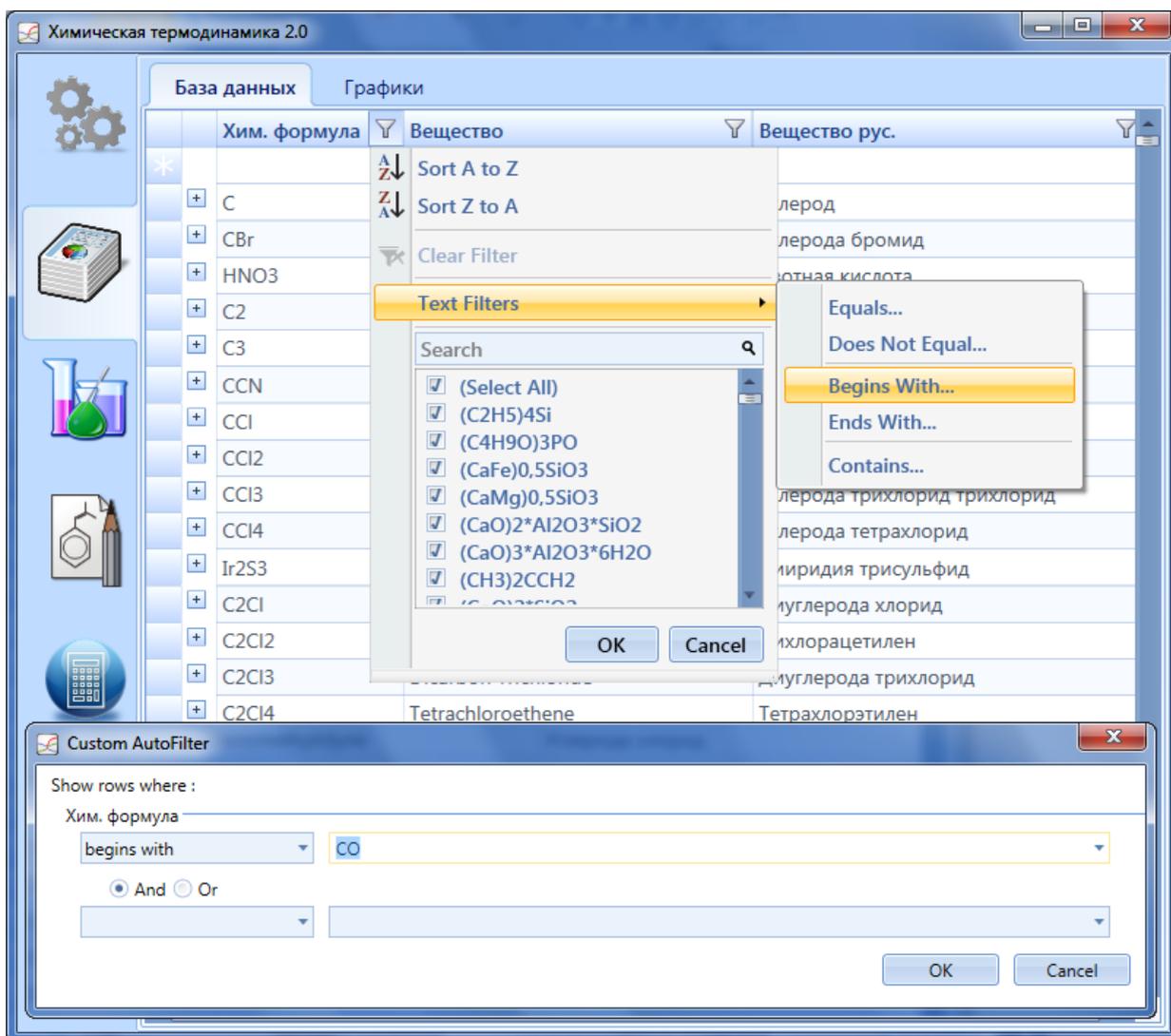


Рисунок 6 – Вид окна с выпадающим меню текстовых фильтров для поиска

5.3 Просмотр данных

Чтобы раскрыть таблицу с данными, следует нажать на значок «+» слева от формулы интересующего вещества. После этого раскроется таблица, содержащая все данные из всех доступных источников, как показано на рисунке 7.

| Хим. формула | Вещество | Вещество рус. |
|--------------|-----------------|----------------------------------|
| CO | Carbon Monoxide | Углерода монооксид |
| CO2 | Carbon Dioxide | Углерода диоксид, углекислый газ |

| Фазово... | T | Cp | S | (G-H298)/T | H | H-H298 | G | ΔHf |
|-----------|--------------|--------|---------|------------|----------|--------|----------|----------|
| GAS | 298.14999... | 37.132 | 213.77 | 213.77 | -393.505 | 0 | -457.24 | -393.505 |
| GAS | 300 | 37.217 | 214 | 213.77 | -393.436 | 0.069 | -457.636 | -393.506 |
| GAS | 400 | 41.326 | 225.291 | 215.282 | -389.501 | 4.004 | -479.618 | -393.58 |
| GAS | 500 | 44.625 | 234.88 | 218.266 | -385.198 | 8.307 | -502.638 | -393.666 |
| GAS | 600 | 47.323 | 243.262 | 221.748 | -380.596 | 12.909 | -526.554 | -393.805 |
| GAS | 700 | 49.563 | 250.731 | 225.364 | -375.749 | 17.756 | -551.26 | -393.99 |
| GAS | 800 | 51.434 | 257.475 | 228.963 | -370.696 | 22.809 | -576.676 | -394.198 |
| GAS | 900 | 52.999 | 263.626 | 232.478 | -365.472 | 28.033 | -602.735 | -394.412 |
| GAS | 1000 | 54.308 | 269.28 | 235.879 | -360.105 | 33.4 | -629.384 | -394.626 |
| GAS | 1100 | 55.412 | 274.509 | 239.156 | -354.617 | 38.888 | -656.577 | -394.837 |
| GAS | 1200 | 56.342 | 279.371 | 242.307 | -349.028 | 44.477 | -684.274 | -395.042 |
| GAS | 1300 | 57.13 | 283.913 | 245.335 | -343.354 | 50.151 | -712.441 | -395.242 |
| GAS | 1400 | 57.803 | 288.172 | 248.244 | -337.606 | 55.899 | -741.047 | -395.437 |
| GAS | 1500 | 58.381 | 292.18 | 251.041 | -331.796 | 61.709 | -770.067 | -395.628 |
| GAS | 1600 | 58.883 | 295.965 | 253.732 | -325.932 | 67.573 | -799.476 | -395.815 |
| GAS | 1700 | 59.321 | 299.548 | 256.322 | -320.022 | 73.483 | -829.253 | -396 |
| GAS | 1800 | 59.705 | 302.95 | 258.819 | -314.07 | 79.435 | -859.379 | -396.185 |
| GAS | 1900 | 60.046 | 306.187 | 261.228 | -308.082 | 85.423 | -889.837 | -396.371 |
| GAS | 2000 | 60.349 | 309.275 | 263.553 | -302.062 | 91.443 | -920.612 | -396.556 |

Рисунок 7 – Таблица с данными по свойствам индивидуального вещества

5.4 Экспорт данных

Для экспорта табличных данных в Microsoft Excel следует выбрать в списке веществ строки, содержащие интересующие вещества и затем в нижнем правом углу окна нажать кнопку «Экспорт в Excel». Чтобы снять всё выделение, следует нажать клавишу *Esc*.

5.5 Построение графиков

Для построения графиков в модуле «Работа с базой данных» следует в верхней части окна выбрать вкладку «графики» и далее в появившемся окне слева нажать на вкладку «Работа с графиками». После этого слева выдвинется панель, которую можно закрепить на экране с помощью кнопки . Далее в выпадающем списке следует отметить вещества, для которых нужно построить графики. В качестве примера на рисунке 8 показан выбор двух веществ (CO и CO₂).

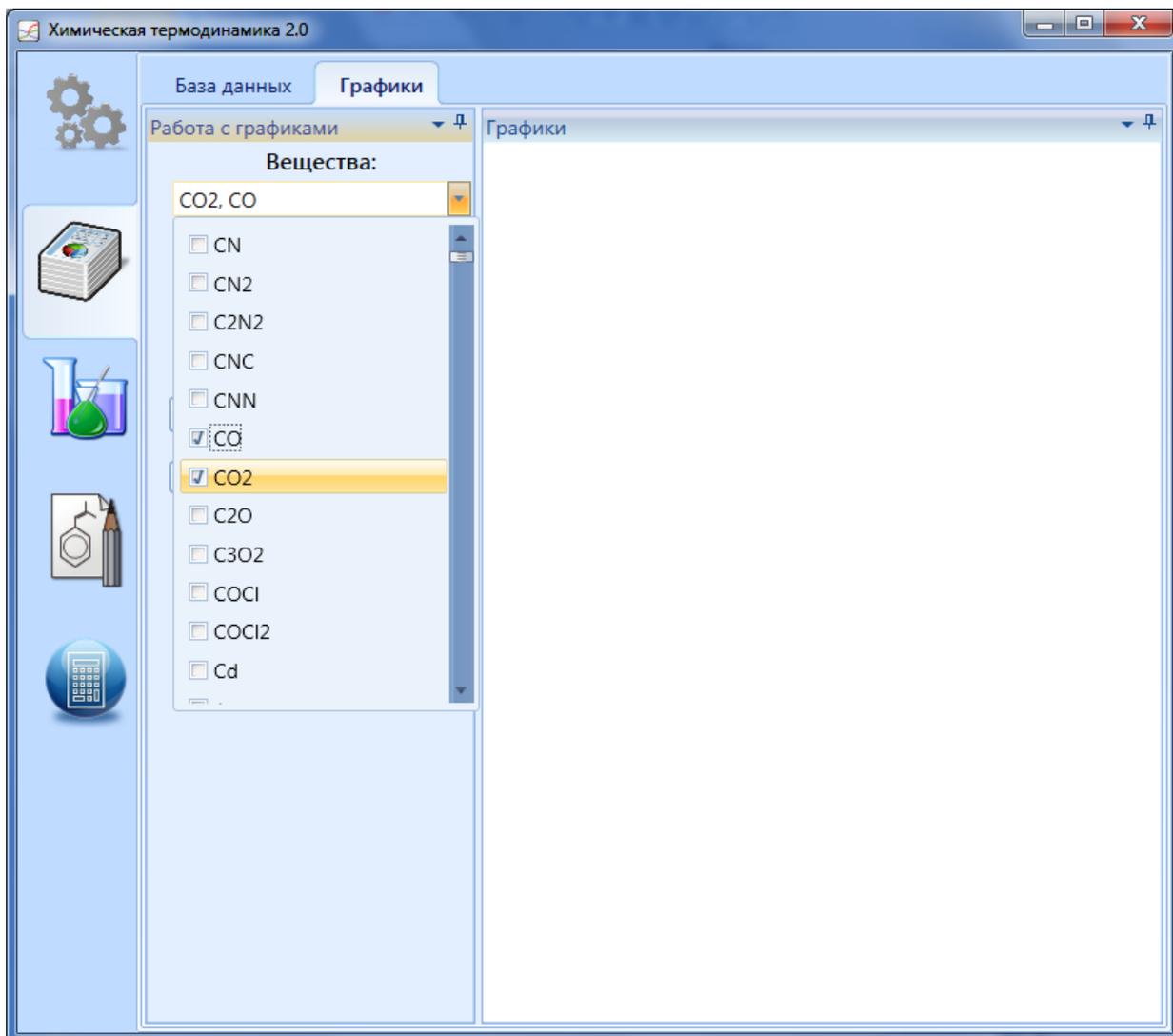


Рисунок 8 – Вид окна построения графиков с выпадающим списком

Далее можно выбрать аргументы по осям абсцисс и ординат. Чтобы построить график следует нажать кнопку «Построить». На рисунке 9 приведен пример построения графика зависимости энтальпии CO и CO₂ от температуры.

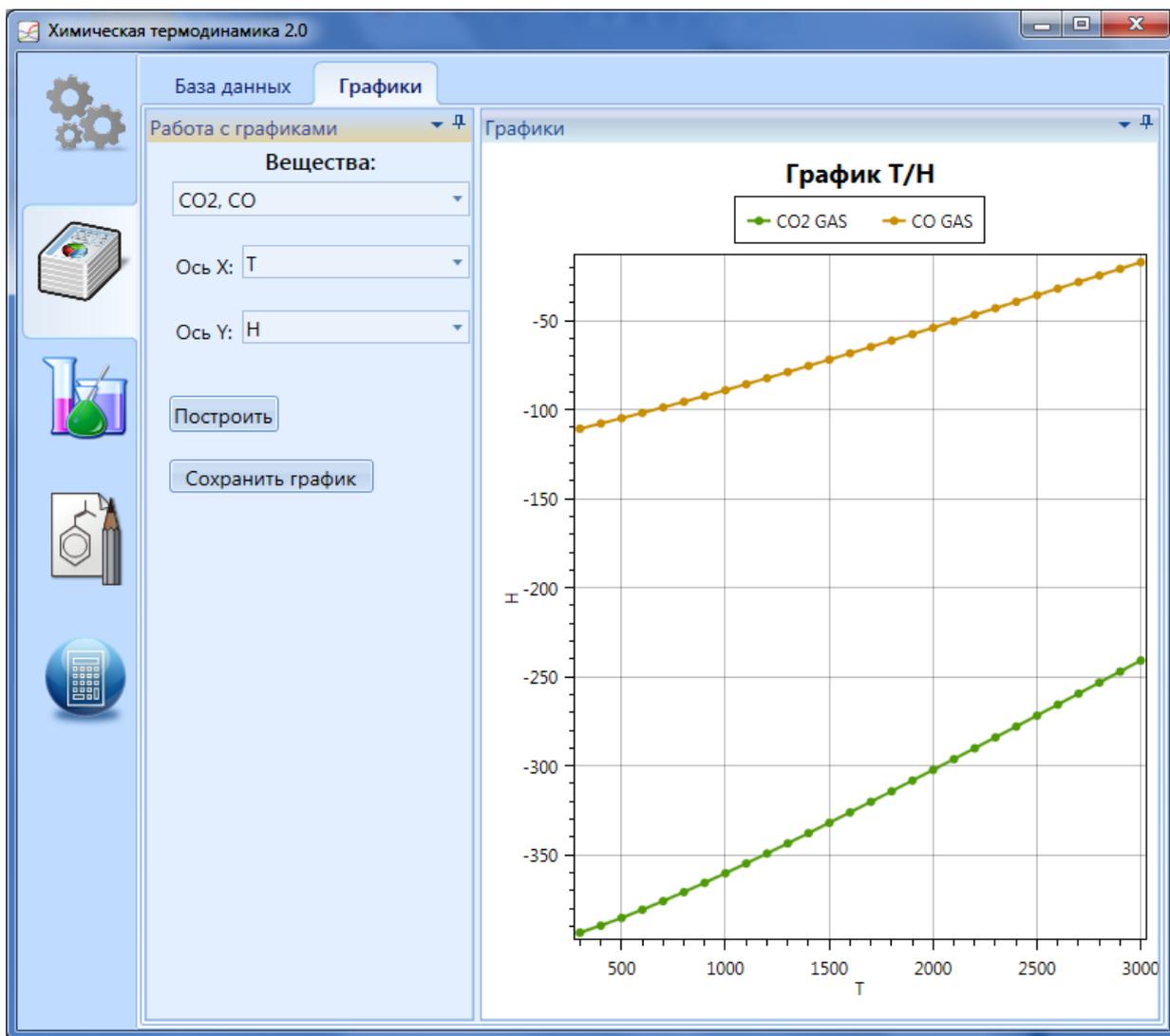


Рисунок 9 – Вид окна с построенным графиком

Чтобы сохранить график следует нажать кнопку «Сохранить график». В открывшемся окне необходимо выбрать папку для сохранения файла, назначить имя файла (по умолчанию «Graphs») и выбрать тип файла (BMP, PNG или SVG), после чего нажать кнопку «Сохранить».

6 Расчёт равновесия

6.1 Назначение модуля

Функция «Расчёт равновесия» позволяет рассчитывать химически равновесные составы в многокомпонентных многофазных системах. С типами и примерами решаемых задач можно ознакомиться по публикациям [1, 4]. При постановке задачи пользователь задаёт набор рассматриваемых веществ и граничные условия для расчёта: исходное соотношение веществ или элементный состав, температуру или диапазон температур, давление или диапазон давлений. Исходные данные для расчёта берутся из базы данных. Программа рассчитывает химически равновесный состав и далее выводит результаты расчёта в виде графиков и таблиц. Результаты расчёта также можно экспортировать в виде таблицы в Microsoft Excel.

6.2 Загрузка варианта расчета

В стартовом окне программного средства TeDu необходимо выбрать вкладку с интересующей задачей. Любой расчет начинается с выбора уже сохраненного варианта или создания нового, как показано на рисунке. Чтобы загрузить сохраненный вариант необходимо выбрать нужный из списка и нажать на кнопку «Загрузить» (рисунок 10).

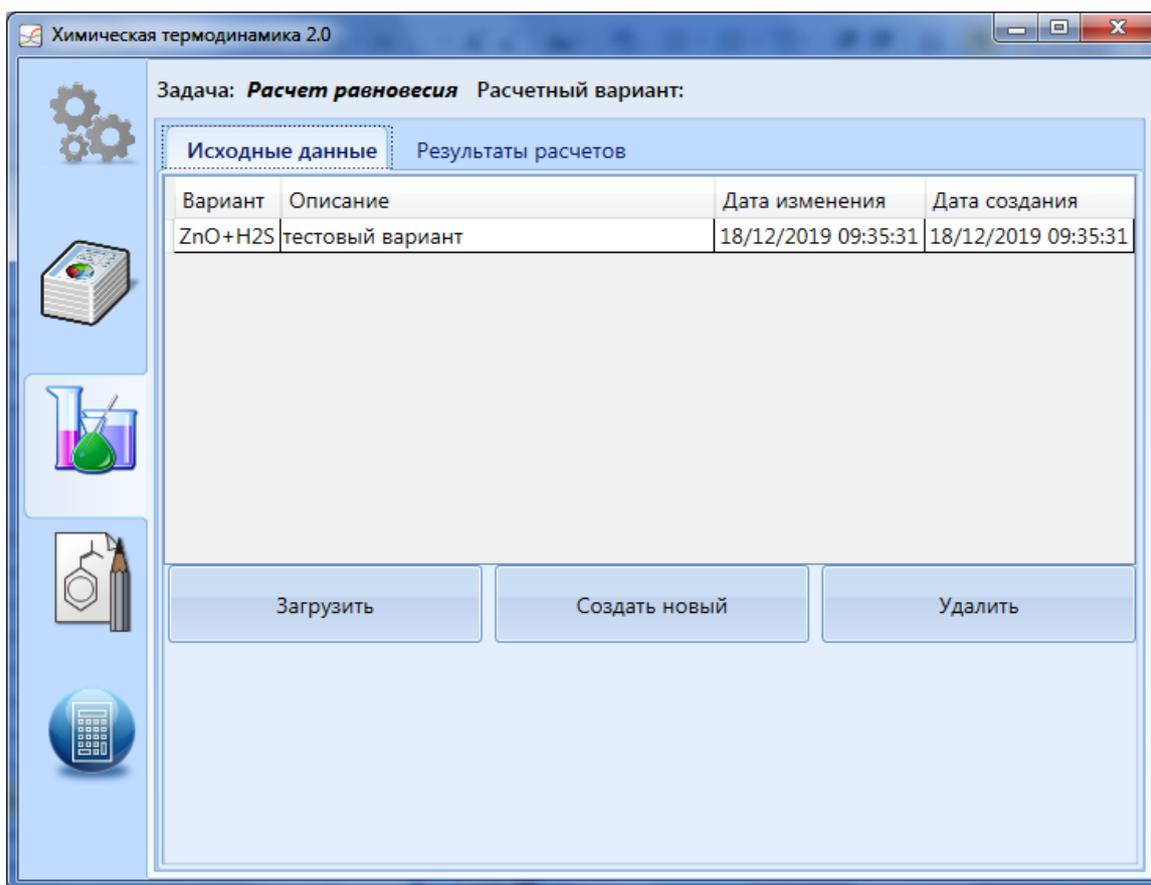


Рисунок 10 – Вид стартового окна модуля «Расчет равновесия»

6.3 Создание нового варианта

Чтобы создать новый вариант следует нажать кнопку «Создать новый». Создание нового расчётного варианта начинается с выбора химических элементов (рисунок 11).

Химическая термодинамика 2.0

Задача: **Расчет равновесия** Расчетный вариант: *** **новый вариант** *** **Расчет**

Исходные данные Результаты расчетов

Выбор элементов Формирование списка веществ Количественный и фазовый состав Настройки расчетной стратегии

Форма таблицы Менделеева: Литературные источники:

Длиннопериодная 6 - Ihsan Barin "Thermochemical Data of Pure Substances"

Список вариантов: Сохранить

IA: H (водород), Li (литий), Na (натрий), K (калий), Rb (рубидий), Cs (цезий), Fr (франций)
 IIA: Be (бериллий), Mg (магний), Ca (кальций), Sr (стронций), Ba (барий), Ra (радий)
 IIIA: B (бор), Al (алюминий), Ga (галлий), In (индий), Tl (таллий)
 IVA: C (углерод), Si (кремний), Ge (германий), Sn (олово), Pb (свинец)
 VA: N (азот), P (фосфор), As (мышьяк), Sb (сурьма), Bi (висмут)
 VIA: O (кислород), S (сера), Se (селен), Te (теллур), Po (полоний)
 VIIA: F (фтор), Cl (хлор), Br (бром), I (йод), At (астат)
 VIIIA: He (гелий), Ne (неон), Ar (аргон), Kr (криптон), Xe (ксенон), Rn (радон)
 VIII: Fe (железо), Co (кобальт), Ni (никель), Cu (медь), Zn (цинк)
 IX: Rh (родий), Pd (палладий), Ag (серебро), Cd (кадмий)
 X: Ru (рутиний), Rh (родий), Pd (палладий), Ag (серебро), Cd (кадмий)
 XI: Ir (иридий), Pt (платина), Au (золото), Hg (ртуть)
 XII: Zn (цинк), Cd (кадмий), Hg (ртуть)
 XIII: Al (алюминий), Ga (галлий), In (индий), Tl (таллий)
 XIV: Si (кремний), Ge (германий), Sn (олово), Pb (свинец)
 XV: P (фосфор), As (мышьяк), Sb (сурьма), Bi (висмут)
 XVI: S (сера), Se (селен), Te (теллур), Po (полоний)
 XVII: Cl (хлор), Br (бром), I (йод), At (астат)
 XVIII: He (гелий), Ne (неон), Ar (аргон), Kr (криптон), Xe (ксенон), Rn (радон)
 XIX: K (калий), Rb (рубидий), Cs (цезий), Fr (франций)
 XX: Ca (кальций), Sr (стронций), Ba (барий), Ra (радий)
 XXI: Sc (скандий), Y (иттрий), La (лантан), Ac (актиний)
 XXII: Ti (титан), Zr (цирконий), Hf (гафний), Rf (резофорбий)
 XXIII: V (ванадий), Nb (ниобий), Ta (тантал), Db (думбрий)
 XXIV: Cr (хром), Mo (молибден), W (вольфрам), Sg (сигборий)
 XXV: Mn (марганец), Tc (технеций), Re (рений), Bh (борий)
 XXVI: Fe (железо), Ru (рутиний), Rh (родий), Hs (хассий)
 XXVII: Co (кобальт), Rh (родий), Ir (иридий), Mt (майтербий)
 XXVIII: Ni (никель), Pd (палладий), Pt (платина), Ds (дэбнилий)
 XXIX: Cu (медь), Ag (серебро), Au (золото), Rg (рогений)
 XXX: Zn (цинк), Cd (кадмий), Hg (ртуть), Cn (кэньоний)
 XXXI: Ga (галлий), In (индий), Tl (таллий), Nh (нихоний)
 XXXII: Sn (олово), Pb (свинец), Fl (флеровий)
 XXXIII: Sb (сурьма), Bi (висмут), Ts (теннессиум)
 XXXIV: Te (теллур), Po (полоний), Og (оганесоний)
 XXXV: I (йод), At (астат), Lv (леривий)
 XXXVI: Xe (ксенон), Rn (радон), Uu (унунвений)
 XXXVII: Cs (цезий), Fr (франций), Uub (унбивений)
 XXXVIII: Ba (барий), Ra (радий), Uuq (унквигений)
 XXXIX: La (лантан), Ac (актиний), Uur (унригений)
 XL: Ce (церий), Pr (празетим), Nd (неодим), Pm (прометей), Sm (самарий), Eu (европий), Gd (гадолиний), Tb (тербий), Dy (диспрозий), Ho (гольмий), Er (эрбий), Tm (тулий), Yb (иттербий), Lu (лютеций)
 XLI: Th (торий), Pa (практиний), U (уран), Np (нептуний), Pu (плутоний), Am (амерций), Cm (камериум), Bk (берклий), Cf (калфорний), Es (эйзенштейний), Fm (фермий), Md (менделеевий), No (нобелий), Lr (лоуренсий)

Назад Далее

Рисунок 11 – Вид страницы выбора химических элементов

Необходимо выделить в таблице химические элементы, входящие в элементный состав рассматриваемой системы и нажать кнопку «Далее» (рисунок 12).

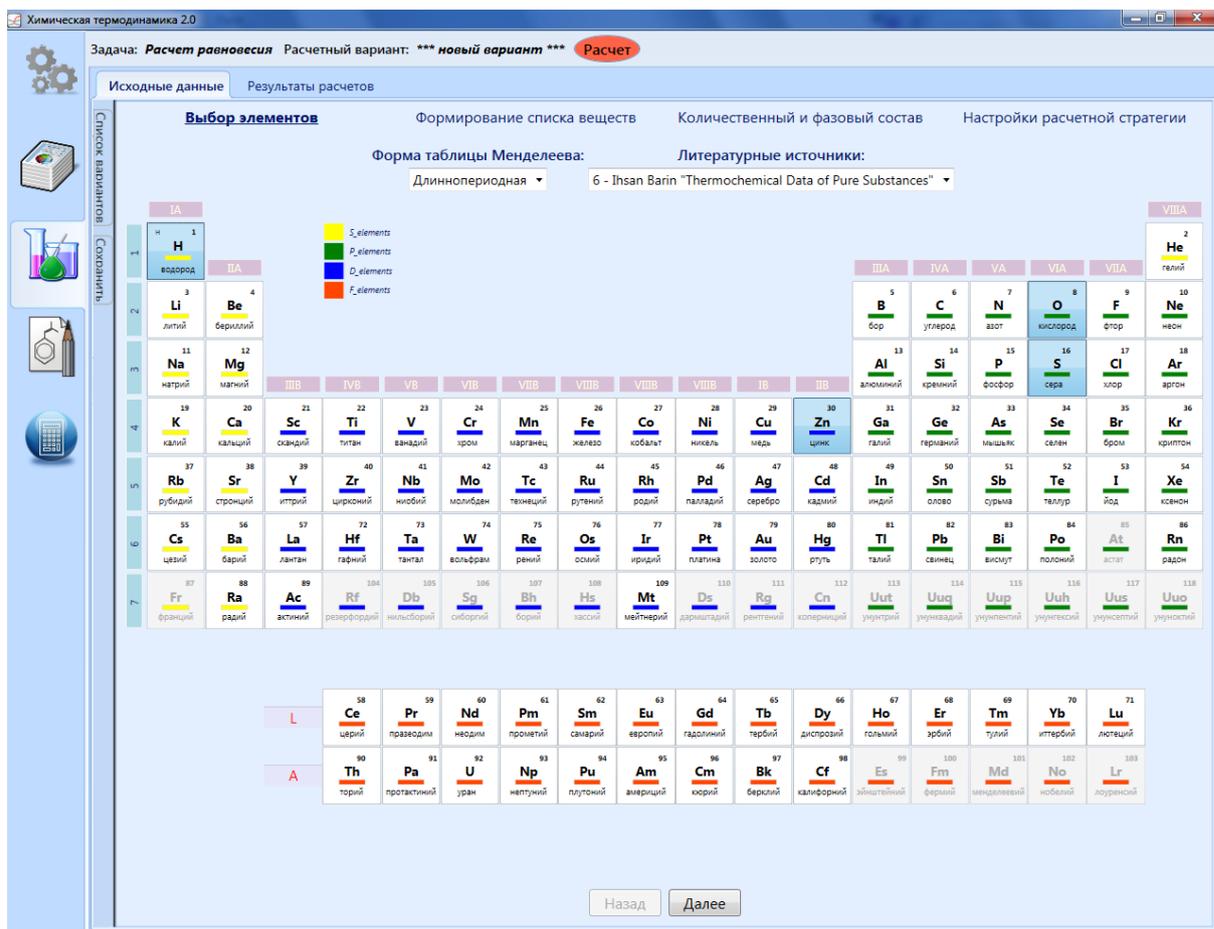


Рисунок 12 – Вид страницы выбора химических элементов с выделенными элементами

В открывшейся вкладке «Формирование списка веществ» отобразится список веществ, состоящих из выбранных элементов, по которым есть информация в базе данных (рисунок 13).

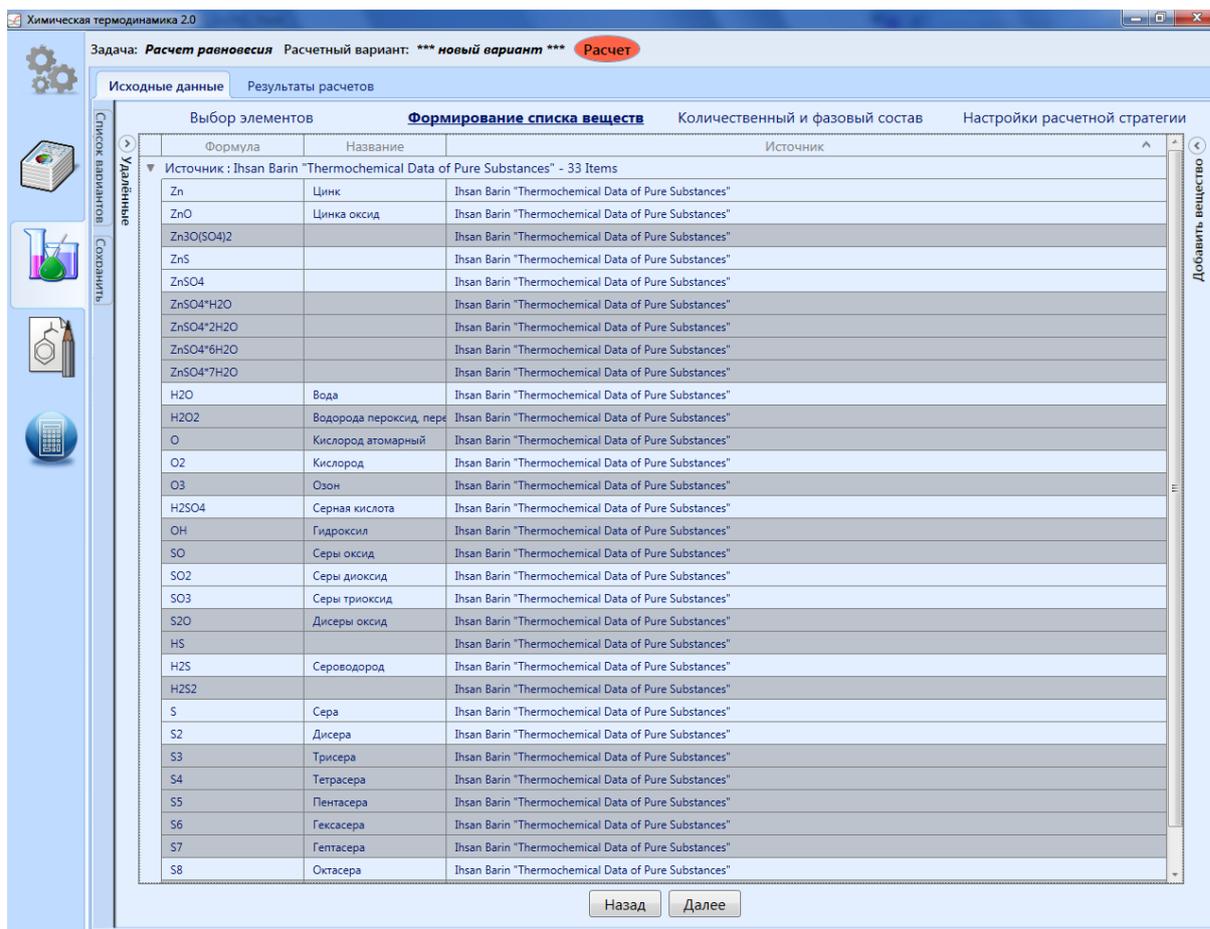


Рисунок 13 – Вид страницы формирования списка веществ

Пользователю необходимо отредактировать список веществ в соответствии с постановкой задачи. Для этого нужно выделить вещества², не входящие в рассматриваемую систему и нажать Delete (рисунок 14).

² Выделение нескольких веществ осуществляется при зажатой клавише Ctrl

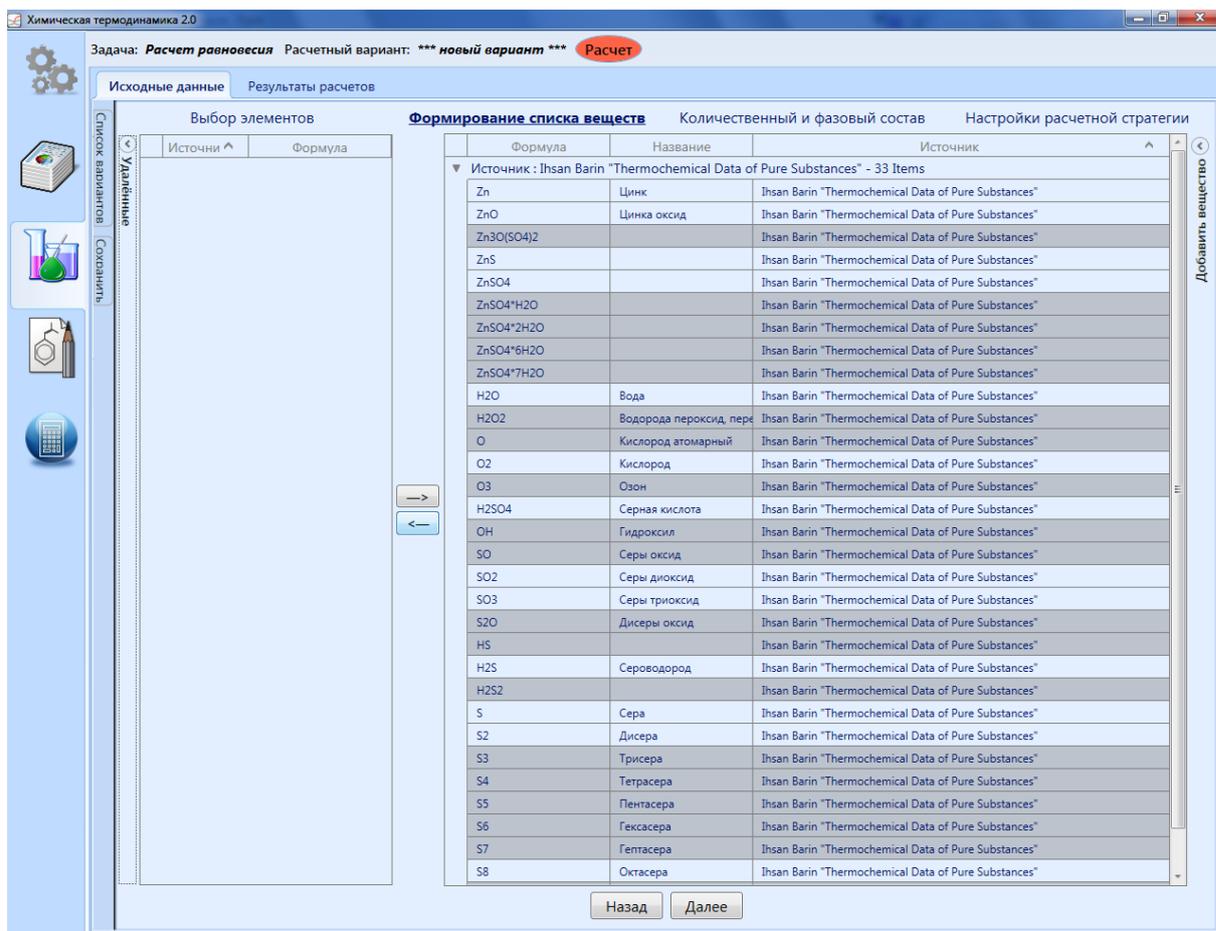


Рисунок 14 – Вид страницы формирования списка веществ с раскрытым списком удаленных веществ

Удаленные вещества можно вернуть в список. Для этого следует открыть вкладку «Удаленные», выделить необходимые вещества и нажать на стрелку вправо. Также, при открытой вкладке «Удаленные», можно удалять выделенные в основном списке вещества путем нажатия стрелки влево (рисунок 15).

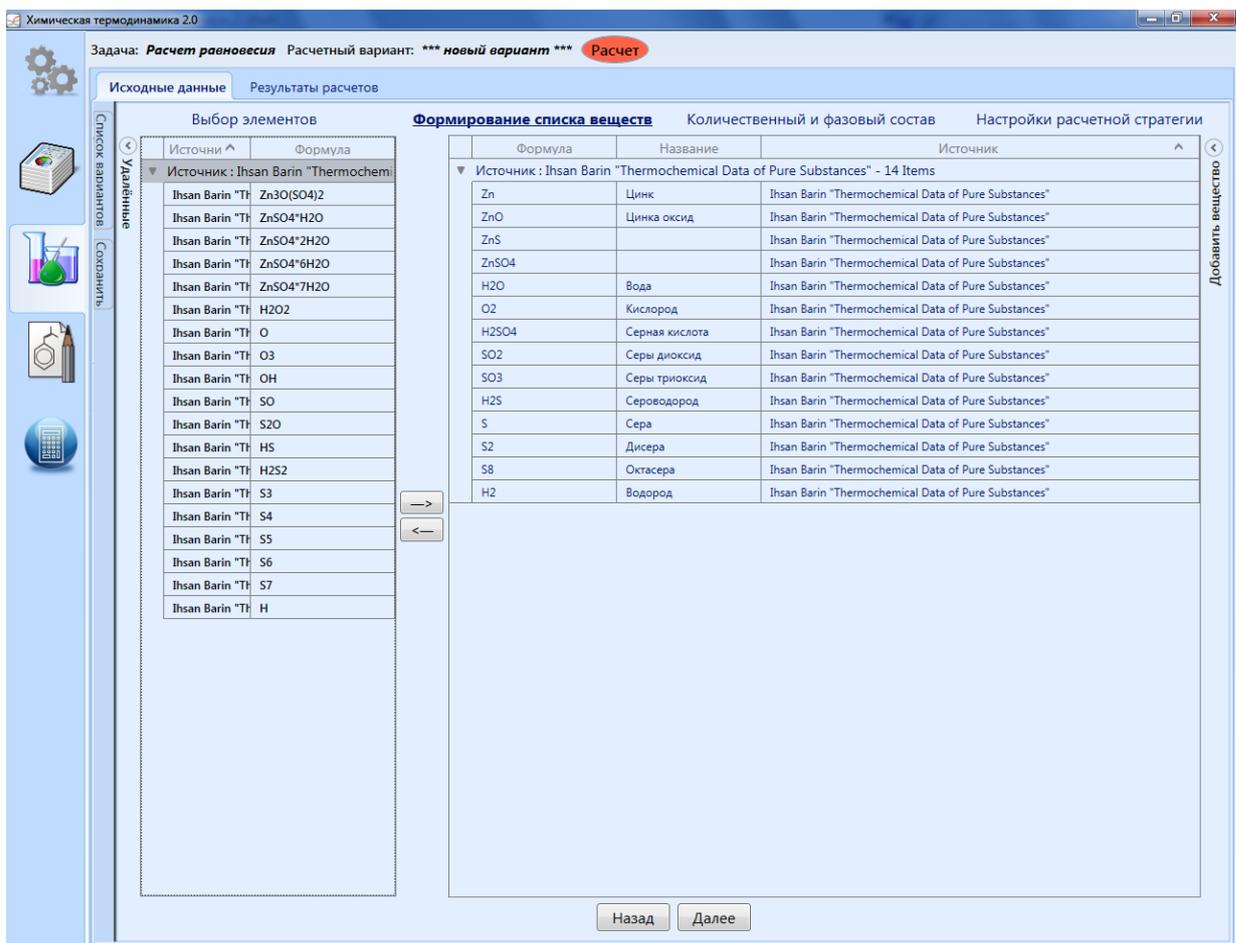


Рисунок 15 – Редактирование списка веществ

После редактирования списка веществ необходимо нажать кнопку «Далее» для перехода на следующую вкладку (рисунок 16).

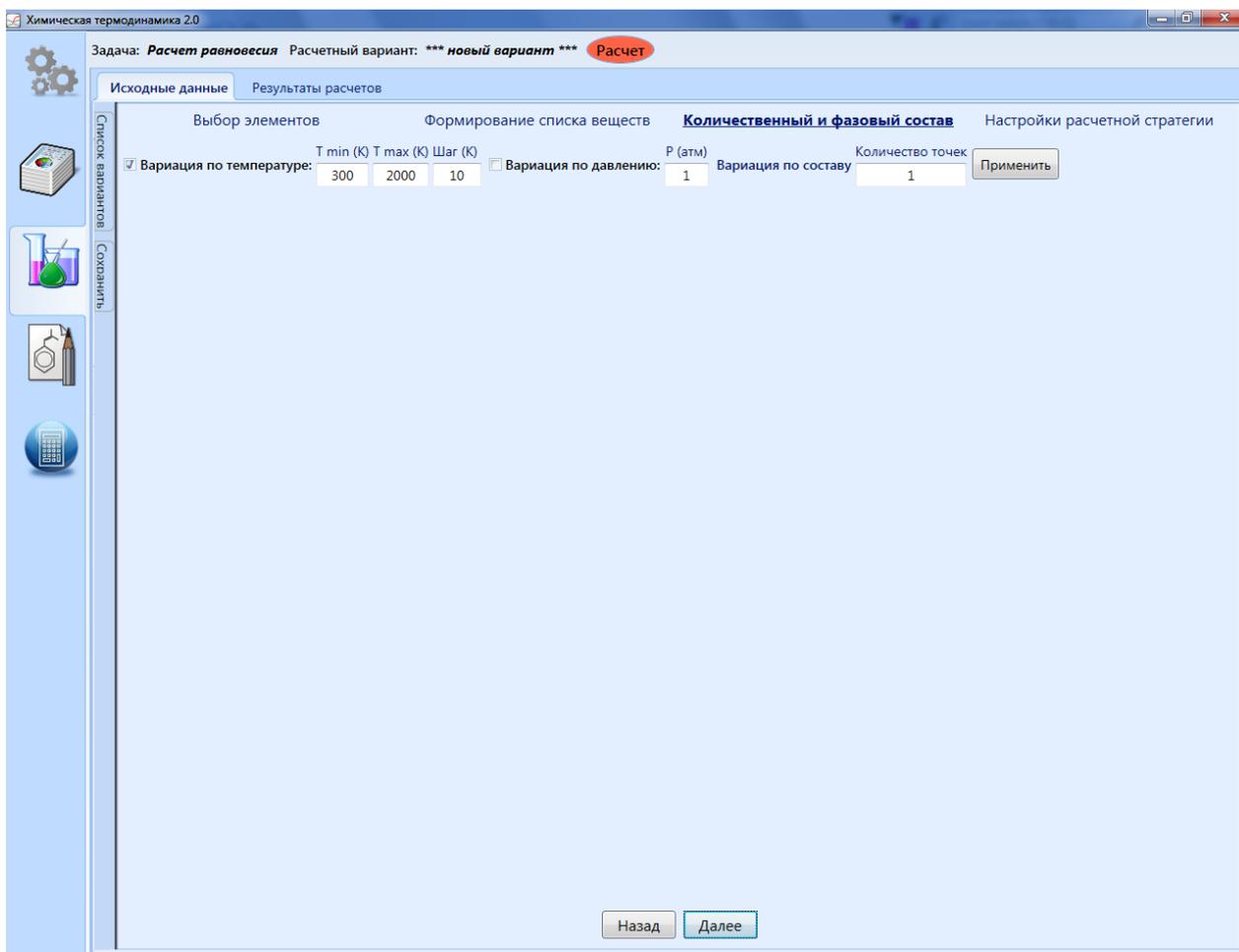


Рисунок 16 – Вид страницы задания количественного и фазового состава

6.4 Постановка задачи

Вкладка «Количественный и фазовый состав» предназначена для задания исходных данных для расчета (рисунок 17). Пользователь выбирает одну из трех постановок задач:

1. с вариацией по температуре – для определенного диапазона температур с заданным шагом, при постоянном давлении;
2. с вариацией по давлению – для определенного диапазона давлений с заданным шагом по давлению, при постоянной температуре;
3. с вариацией по составу – для определенного диапазона количества вещества компонентов системы, при постоянных давлении и температуре.

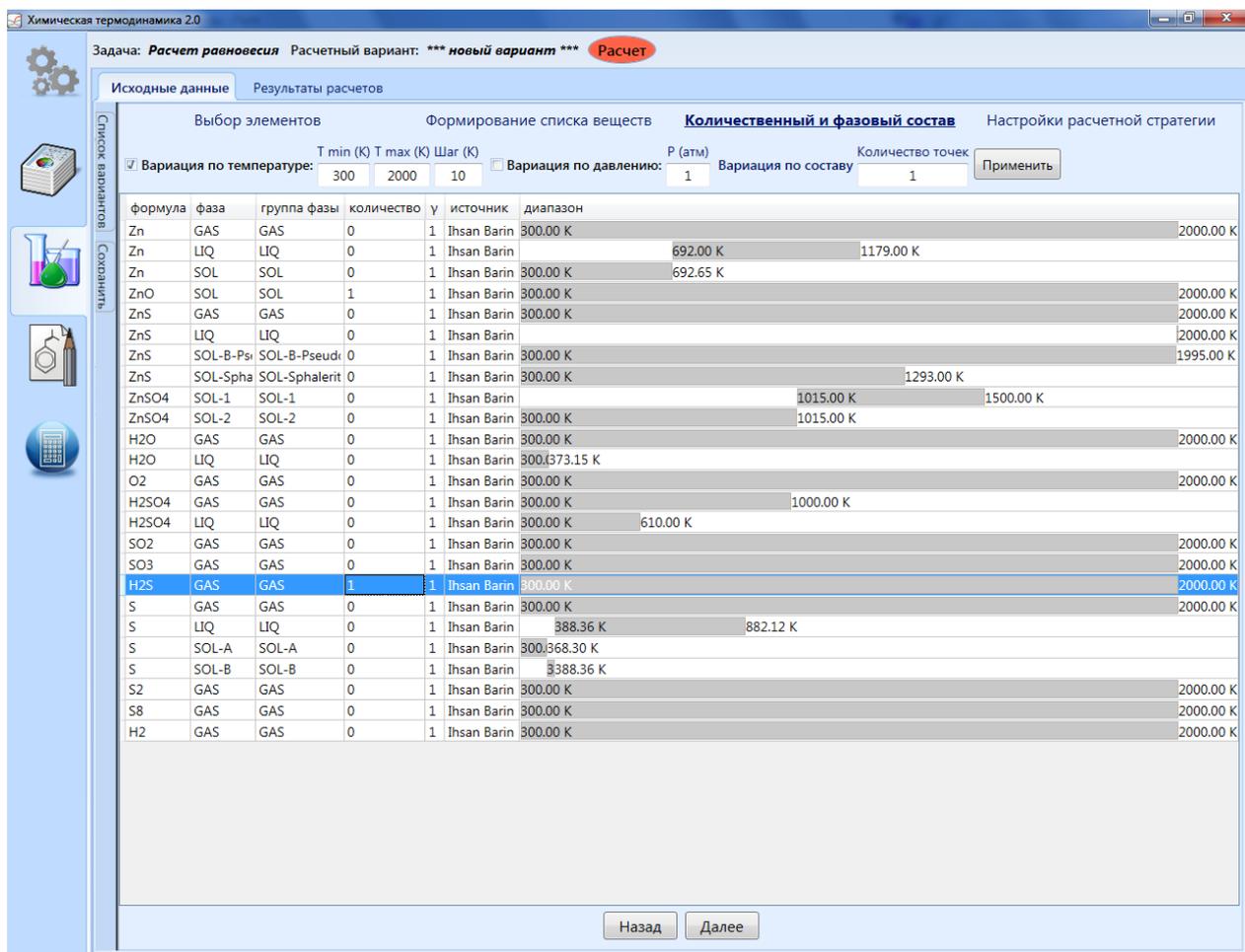


Рисунок 17 – Вид страницы задания исходных данных

При выборе варианта «Вариация по температуре» пользователю необходимо указать минимальную и максимальную температуры, задать шаг по температуре и нажать кнопку «Применить». В сформированном списке отобразятся вещества, выбранные на предыдущем этапе. Для каждого вещества выводится информация о наличии данных о термодинамических свойствах для разных агрегатных состояний в рассматриваемом диапазоне температур. В данном списке пользователю необходимо задать соотношение компонентов в системе, указав значения в столбце «количество» (рисунок 18).

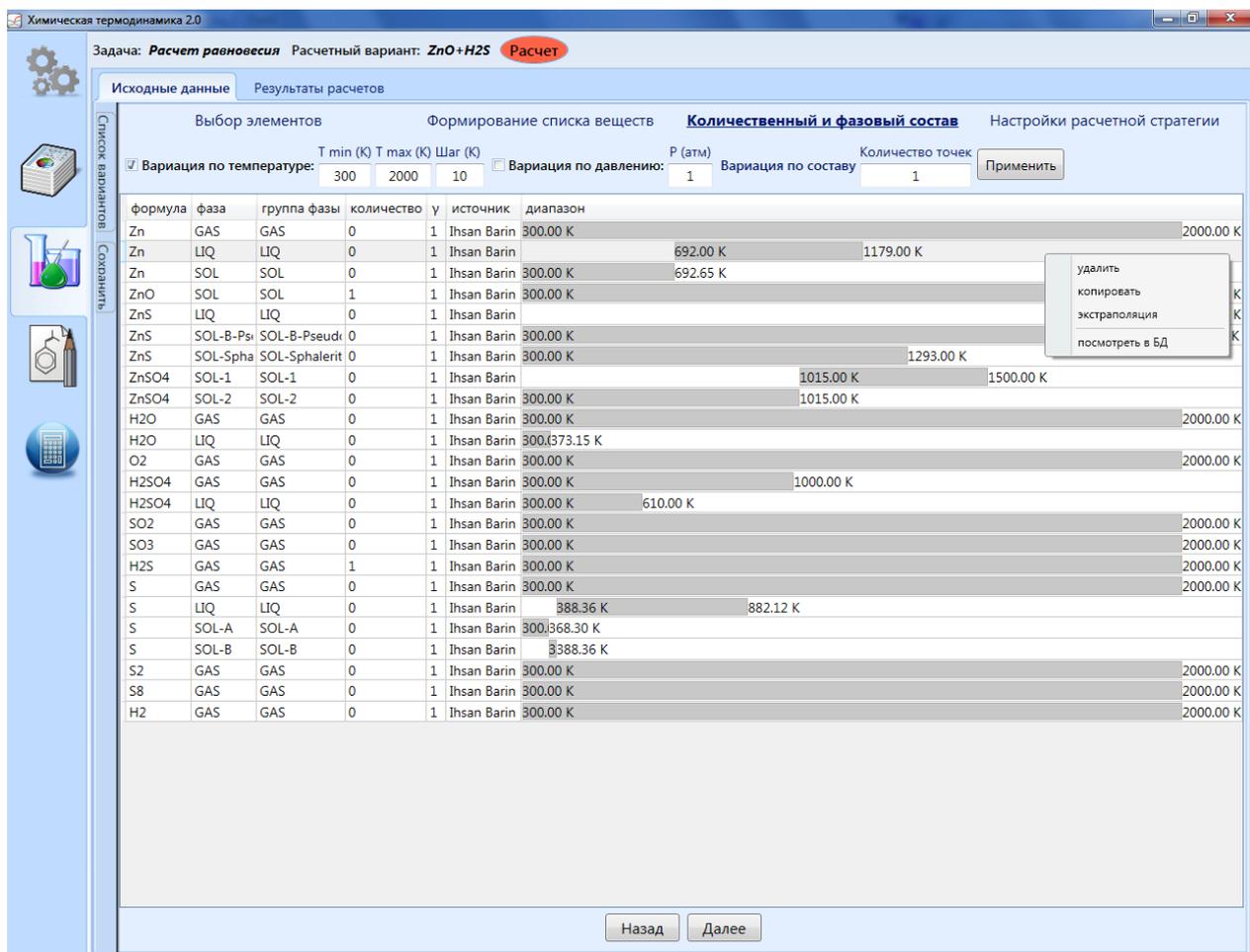


Рисунок 18 – Меню экстраполяции данных

6.5 Экстраполяция данных

Пользователь имеет возможность экстраполировать термодинамические данные веществ на интересующий диапазон. Для этого необходимо вызвать контекстное меню нажатием правой кнопки мыши в строке вещества, для которого предполагается произвести экстраполяцию данных. Выбрать в контекстном меню пункт «экстраполяция» (рисунок 19).

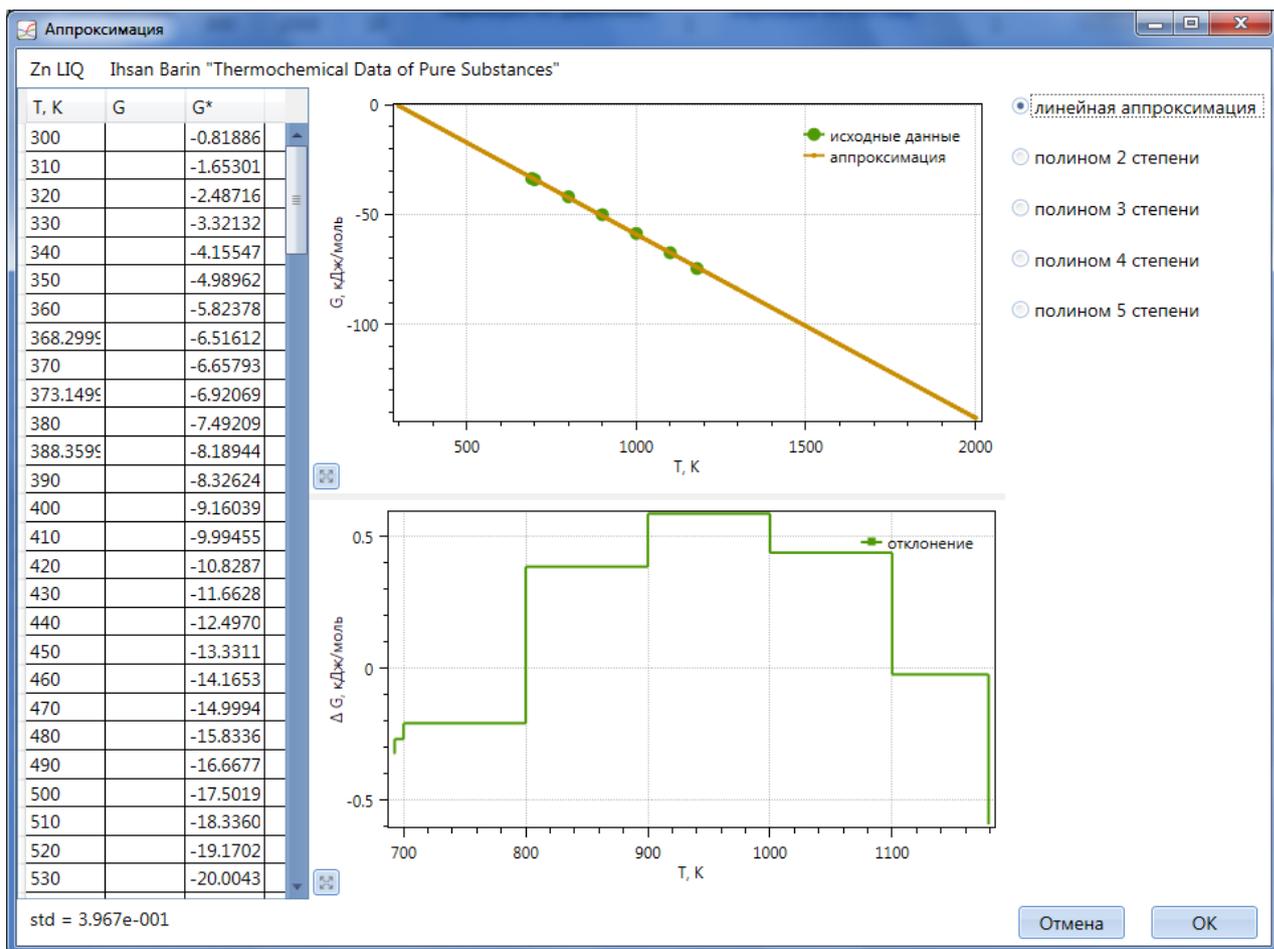


Рисунок 19 – Вид окна экстраполяции данных

В появившемся окне «Аппроксимация» пользователь должен выбрать вид аппроксимирующей функции, с помощью которой будет произведена экстраполяция данных. Выбор функции упрощается анализом отклонения аппроксимирующей кривой от исходных данных.

6.6 Сохранение варианта

После формирования постановки задачи необходимо сохранить расчетный вариант. Для этого следует привести курсор на пункт «Сохранить» на панели слева, задать имя варианта и привести краткое описание задачи, после чего нажать на кнопку «Сохранить» (рисунок 20).

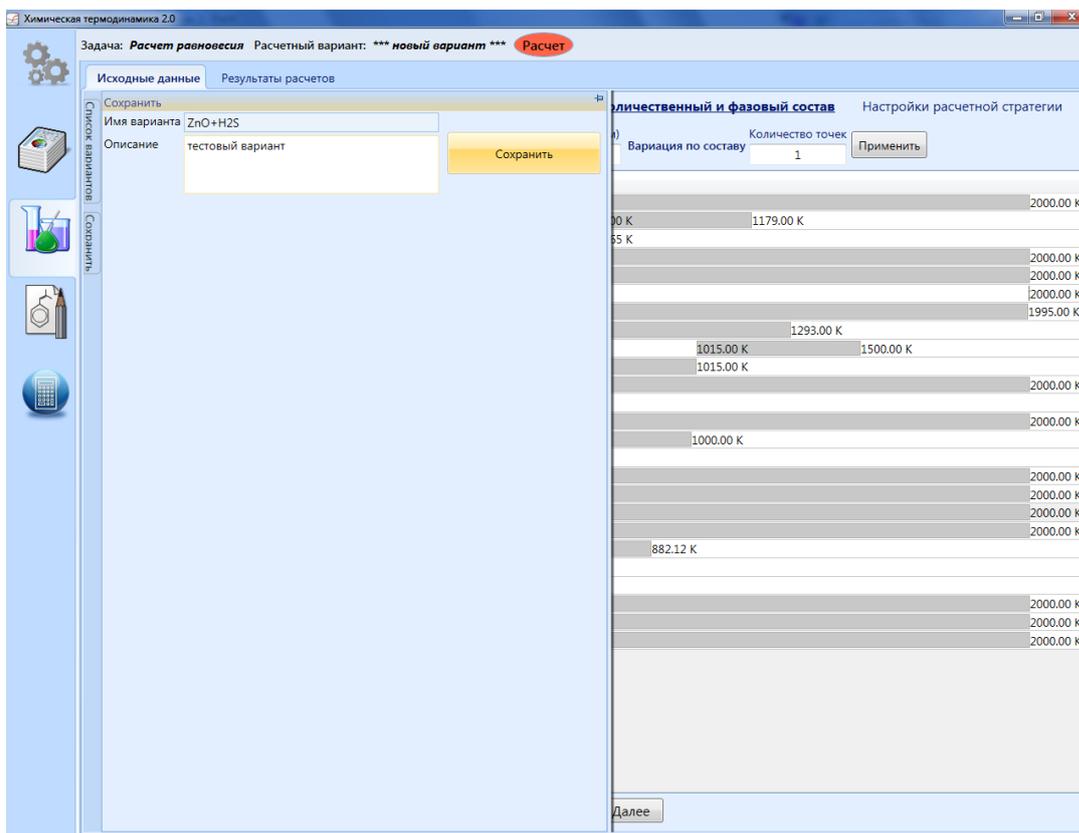


Рисунок 20 – Меню сохранения варианта расчета

6.7 Настройка расчетной стратегии и запуск расчета

После сохранения расчетного варианта необходимо перейти на следующую вкладку нажав кнопку «Далее». На вкладке «Настройка расчетной стратегии» пользователю доступны параметры расчетной стратегии (рисунок 21).

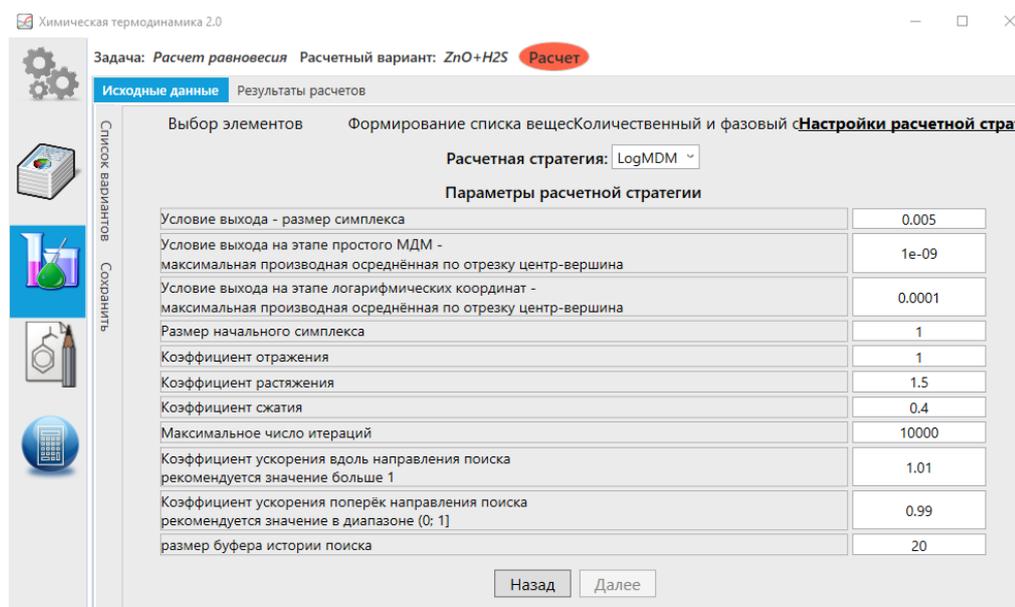


Рисунок 21 – Вид страницы настройки расчетной стратегии. Параметры расчетной стратегии «LogMDM»

Параметры расчетной стратегии, установленные по умолчанию, позволяют получать корректные результаты для большинства задач. При необходимости пользователь может их корректировать. После настройки параметров расчетной стратегии следует нажать на кнопку «Расчет» на верхней панели. При необходимости внесения изменений в постановку задачи пользователь может вернуться на вкладку «Количественный и фазовый состав» нажатием кнопки «Назад».

6.8 Результаты расчета

После проведения расчета автоматически открывается вкладка «Результаты расчетов». Результаты расчета представляются в виде графиков или таблицы на соответствующих вкладках. На вкладке «Графики» пользователь может построить график выбрав из раскрывающихся списков интересующие его данные (рисунок 22). По умолчанию строится график зависимости количества вещества от температуры. На вкладке «Таблица» результаты расчета представлены в виде таблицы (рисунок 23). Результаты расчета можно экспортировать в MS Excel. Для этого следует нажать на кнопку «Экспорт в MS Excel».

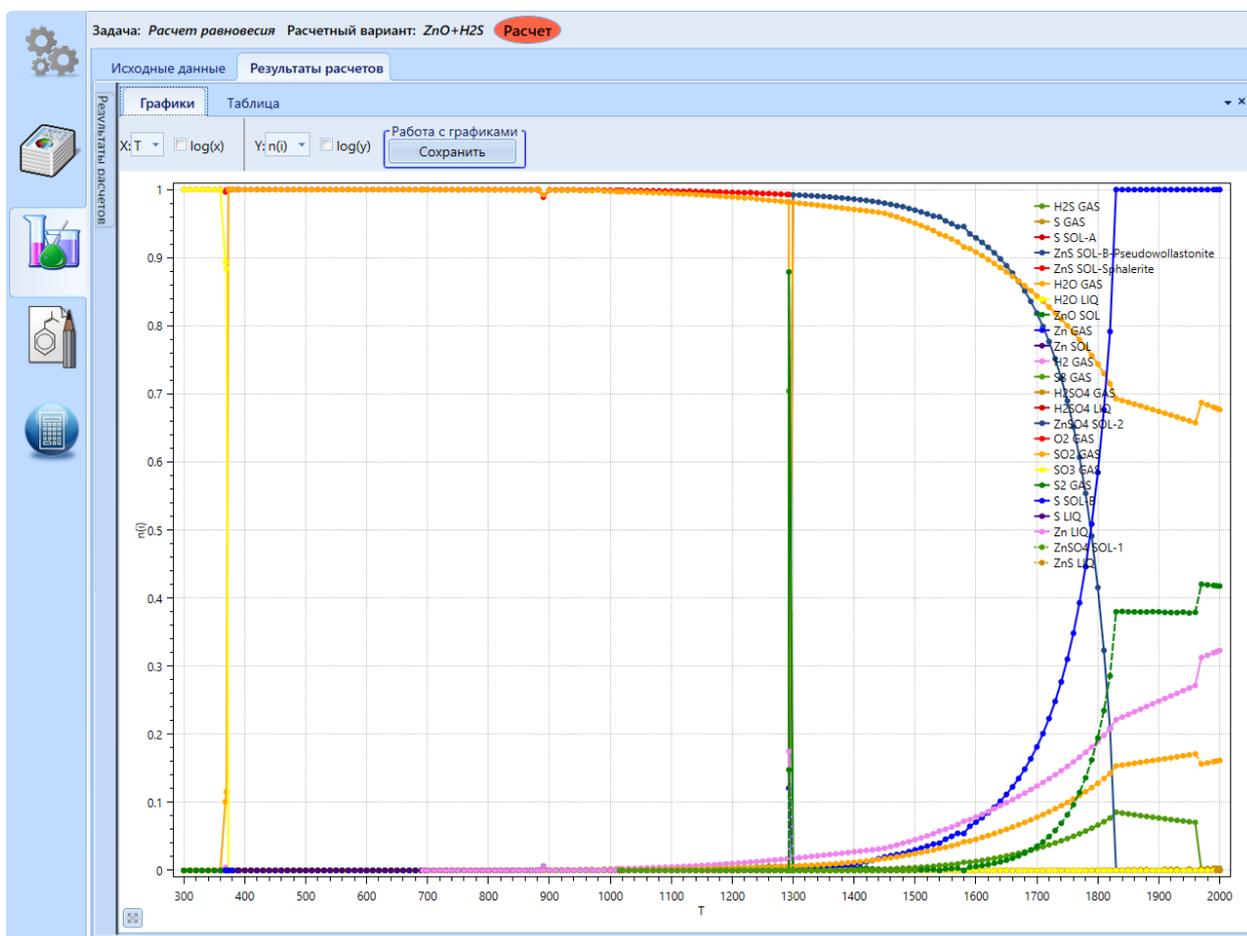


Рисунок 22 – Вид страницы «Результаты расчетов». Работа с графиками

Задача: Расчет равновесия Расчетный вариант: ZnO+H2S **Расчет**

Исходные данные Результаты расчетов

Графики Таблица

Экспорт
Экспорт в Ms Excel

| Температура, К | Полная энергия Гиббса, кДж | Удельная энергия Гиббса, кДж/моль | H2S GAS, моль | S GAS, моль | S SOL-A, моль | ZnS SOL-B-Pseudowollastonite, моль | ZnS SOL-Sphalerite, моль | H2O GAS, г |
|----------------|----------------------------|-----------------------------------|---------------|-------------|---------------|------------------------------------|--------------------------|------------|
| 300 | -5.293e+05 | -2.646e+05 | 1.812e-14 | 1.198e-13 | 5.547e-18 | 1.106e-12 | 1 | 5.53e-18 |
| 310 | -5.307e+05 | -2.654e+05 | 9.864e-15 | 2.548e-15 | 8.697e-15 | 3.308e-14 | 1 | 2.408e-13 |
| 320 | -5.322e+05 | -2.661e+05 | 2.533e-11 | 1.727e-10 | 1.363e-09 | 5.027e-18 | 1 | 7.469e-08 |
| 330 | -5.336e+05 | -2.668e+05 | 1.555e-16 | 3.225e-16 | 3.395e-15 | 1.26e-14 | 1 | 1.847e-14 |
| 340 | -5.351e+05 | -2.675e+05 | 4.834e-18 | 2.081e-17 | 2.148e-07 | 4.966e-18 | 1 | 3.787e-10 |
| 350 | -5.365e+05 | -2.682e+05 | 1.484e-06 | 7.671e-08 | 1.003e-06 | 1.523e-05 | 1 | 6.932e-06 |
| 360 | -5.379e+05 | -2.69e+05 | 7.917e-08 | 2.392e-07 | 7.78e-07 | 7.376e-07 | 1 | 4.683e-05 |
| 368.3 | -5.386e+05 | -2.691e+05 | 0.0004012 | 2.427e-05 | 0.0003186 | 0.001197 | 0.9967 | 0.1011 |
| 368.3 | -5.386e+05 | -2.691e+05 | 0.0004012 | 2.427e-05 | | 0.001197 | 0.9967 | 0.1011 |
| 370 | -5.393e+05 | -2.696e+05 | 0.0003199 | 2.913e-05 | | 8.366e-17 | 0.9994 | 0.1155 |
| 373.1 | -5.4e+05 | -2.7e+05 | 1.012e-15 | 1.582e-16 | | 3.118e-12 | 1 | 1 |
| 373.1 | -5.4e+05 | -2.7e+05 | 5.324e-11 | 1.2e-12 | | 2.082e-14 | 1 | 1 |
| 380 | -5.417e+05 | -2.709e+05 | 1.596e-11 | 1.75e-13 | | 5.428e-10 | 1 | 1 |
| 388.4 | -5.439e+05 | -2.72e+05 | 5.239e-14 | 5.771e-18 | | 4.091e-13 | 1 | 1 |
| 388.4 | -5.439e+05 | -2.72e+05 | 5.871e-18 | 6.255e-13 | | 5.538e-18 | 1 | 1 |
| 390 | -5.443e+05 | -2.722e+05 | 9.023e-11 | 4.465e-15 | | 5.123e-15 | 1 | 1 |
| 400 | -5.469e+05 | -2.735e+05 | 4.638e-18 | 8.048e-15 | | 3.244e-06 | 1 | 1 |
| 410 | -5.497e+05 | -2.749e+05 | 1.486e-17 | 5.847e-11 | | 9.026e-10 | 1 | 1 |
| 420 | -5.525e+05 | -2.763e+05 | 4.751e-10 | 8.948e-16 | | 1.308e-12 | 1 | 1 |
| 430 | -5.553e+05 | -2.777e+05 | 7.904e-10 | 4.609e-14 | | 5.749e-18 | 1 | 1 |
| 440 | -5.581e+05 | -2.791e+05 | 5.693e-18 | 2.132e-10 | | 1.532e-10 | 1 | 1 |
| 450 | -5.609e+05 | -2.805e+05 | 9.475e-09 | 2.425e-10 | | 5.368e-09 | 1 | 1 |
| 460 | -5.637e+05 | -2.819e+05 | 3.882e-09 | 1.053e-11 | | 8.845e-11 | 1 | 1 |
| 470 | -5.665e+05 | -2.833e+05 | 1.092e-08 | 1.559e-10 | | 3.966e-14 | 1 | 1 |
| 480 | -5.693e+05 | -2.847e+05 | 7.161e-09 | 3.914e-14 | | 3.569e-11 | 1 | 1 |
| 490 | -5.721e+05 | -2.861e+05 | 1.06e-08 | 2.068e-16 | | 1.069e-11 | 1 | 1 |
| 500 | -5.749e+05 | -2.875e+05 | 6.751e-17 | 4.55e-13 | | 5.544e-18 | 1 | 1 |
| 510 | -5.779e+05 | -2.889e+05 | 4.895e-12 | 5.228e-18 | | 1.815e-10 | 1 | 1 |
| 520 | -5.809e+05 | -2.904e+05 | 2.828e-08 | 6.49e-11 | | 1.052e-09 | 1 | 1 |
| 530 | -5.838e+05 | -2.919e+05 | 1.047e-17 | 3.228e-09 | | 3.148e-14 | 1 | 1 |
| 540 | -5.868e+05 | -2.934e+05 | 5.777e-08 | 2.297e-11 | | 5.338e-18 | 1 | 1 |
| 550 | -5.898e+05 | -2.949e+05 | 5.097e-18 | 2.39e-10 | | 4.715e-11 | 1 | 1 |
| 560 | -5.927e+05 | -2.964e+05 | 4.957e-18 | 5.638e-18 | | 2.243e-15 | 1 | 1 |

Рисунок 23 – Вид страницы «Результаты расчетов». Работа с таблицами

7 Оценка свойств

7.1 Назначение модуля

Модуль «Оценка свойств» предназначен для оценки значений термодинамических функций (энтальпии образования, энтропии и изобарной теплоемкости) химических соединений по их структуре. Модуль использует математическую модель, обобщающую информацию из базы данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ. Математическая модель использует принципы QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) для оценки свойств различных соединений по данным об их структуре и агрегатном состоянии. В основе метода лежит предположение об аддитивности свойств фрагментов, из которых состоит химическое соединение. Значения характеристик фрагментов, используемые для оценок, получены путём построения множественной линейной регрессии на основе значений справочных данных по энтальпии, энтропии и теплоёмкости индивидуальных веществ. Подробное описание математической модели, способа пакетной обработки данных из базы для формирования исходной выборки, способа получения набора признаков и способа расчета параметров модели и их численные значения приведены в статье [5].

Модуль имеет пользовательский интерфейс с инструментами построения, сохранения, загрузки и редактирования молекулярных графов (рисунок 24).

Исходные данные

| Фрагмент | H | S | Cp |
|-----------|---------|--------|--------|
| -C(-)(-)- | 36.66 | -38.99 | 2.24 |
| -C(H)(H)H | -84.95 | 51.71 | 33.52 |
| -C(-)(H)H | -29.48 | 34.93 | 22.71 |
| -C(-)(H)H | -29.48 | 34.93 | 22.71 |
| -C(H)(H)H | -84.95 | 51.71 | 33.52 |
| -C(C)(H)H | -196.58 | 75.27 | 44.05 |
| -C(H)(H)H | -84.95 | 51.71 | 33.52 |
| g | 269.15 | 181.24 | -13.67 |
| Σ | -204.59 | 442.51 | 178.61 |

| $\Phi 1$ | $\Phi 2$ | H | S | Cp |
|-----------|-----------|-------|-------|-------|
| -C(-)(-)- | -C(C)(H)H | 5.24 | -4.58 | 3.07 |
| -C(-)(H)H | -C(-)(-)- | 5.86 | 7.56 | 0.23 |
| -C(-)(H)H | -C(H)(H)H | 2.57 | -7.46 | -1.00 |
| -C(H)(H)H | -C(-)(-)- | 2.83 | -2.79 | -0.33 |
| -C(-)(H)H | -C(-)(-)- | 5.86 | 7.56 | 0.23 |
| -C(-)(H)H | -C(H)(H)H | 2.57 | -7.46 | -1.00 |
| Σ | | 24.93 | -7.17 | 1.21 |

Оценка свойства

| | |
|----------------|---------|
| H (кДж/моль) | -229.52 |
| S (Дж/моль/К) | 449.67 |
| Cp (Дж/моль/К) | 177.40 |

Рисунок 24 – Вид окна модуля «Оценка свойств»

7.2 Постановка задачи

Для построения и редактирования молекулярных графов в пользовательском интерфейсе реализованы следующие инструменты (рисунок 24):

 – добавление, по нажатию левой кнопки мыши, нового узла (элемента), выбранного из выпадающего списка;

 – добавление, по нажатию левой кнопки мыши, новой связи на узле;

 – выделение узла без сброса предыдущего выделения;

 – изменение кратности связи, по нажатию левой кнопки мыши на связь;

 – упорядочение графа;

 – добавление водорода ко всем незанятым валентностям;

 – удаление выделенных элементов графа;

а также выпадающий список для выбора фазового состояния.

7.3 Результаты расчета

Алгоритм, реализованный в рамках модуля, автоматически разбивает построенный граф на фрагменты, составляет на основе полученного разбиения список фрагментарных дескрипторов и рассчитывает оценочные значения энтальпии, энтропии и теплоёмкости химического соединения.

8 Расчет реакций

8.1 Назначение модуля

Модуль «Расчет реакций» предназначен для расчета изменения термодинамических функций по отдельным реакциям (при заданной температуре или диапазоне ее изменения). Расчет термодинамических функций производится согласно закону Гесса.

8.2 Постановка задачи

При постановке задачи пользовательский интерфейс предполагает запись уравнения реакции в виде текстовой строки. При вводе формул программа ищет соответствия в базе данных и предлагает пользователю варианты окончания вводимой формулы, а также предлагает пользователю автоматически расставить коэффициенты (рисунок 25). Затем задается диапазон температур, в котором требуется рассчитать термодинамические функции реакции. Для веществ, информация о которых есть в базе данных, но не покрывает всего заданного пользователем температурного диапазона, предлагается возможность экстраполяции данных в этот диапазон.

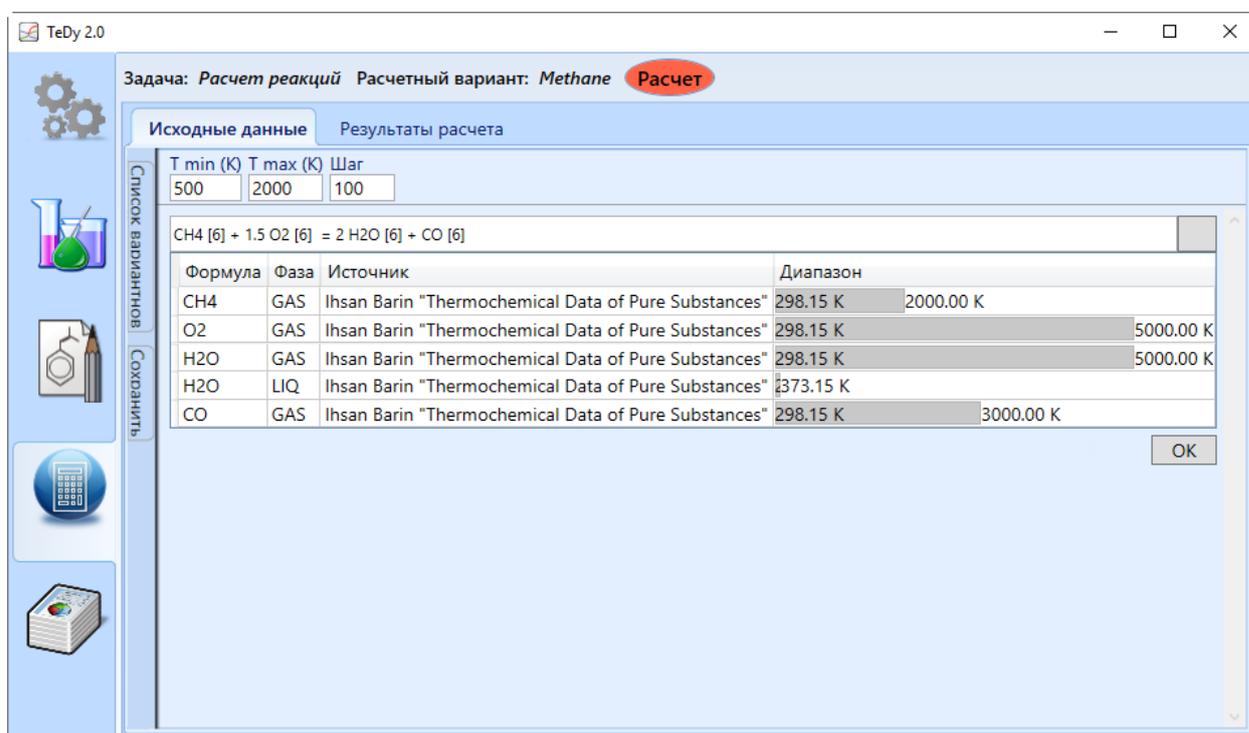


Рисунок 25 – Вид окна модуля «Расчет реакций»

8.3 Результаты расчета

Результаты расчета представляются в виде графиков зависимостей энтальпии, энтропии и энергии Гиббса от температуры (рисунок 26).

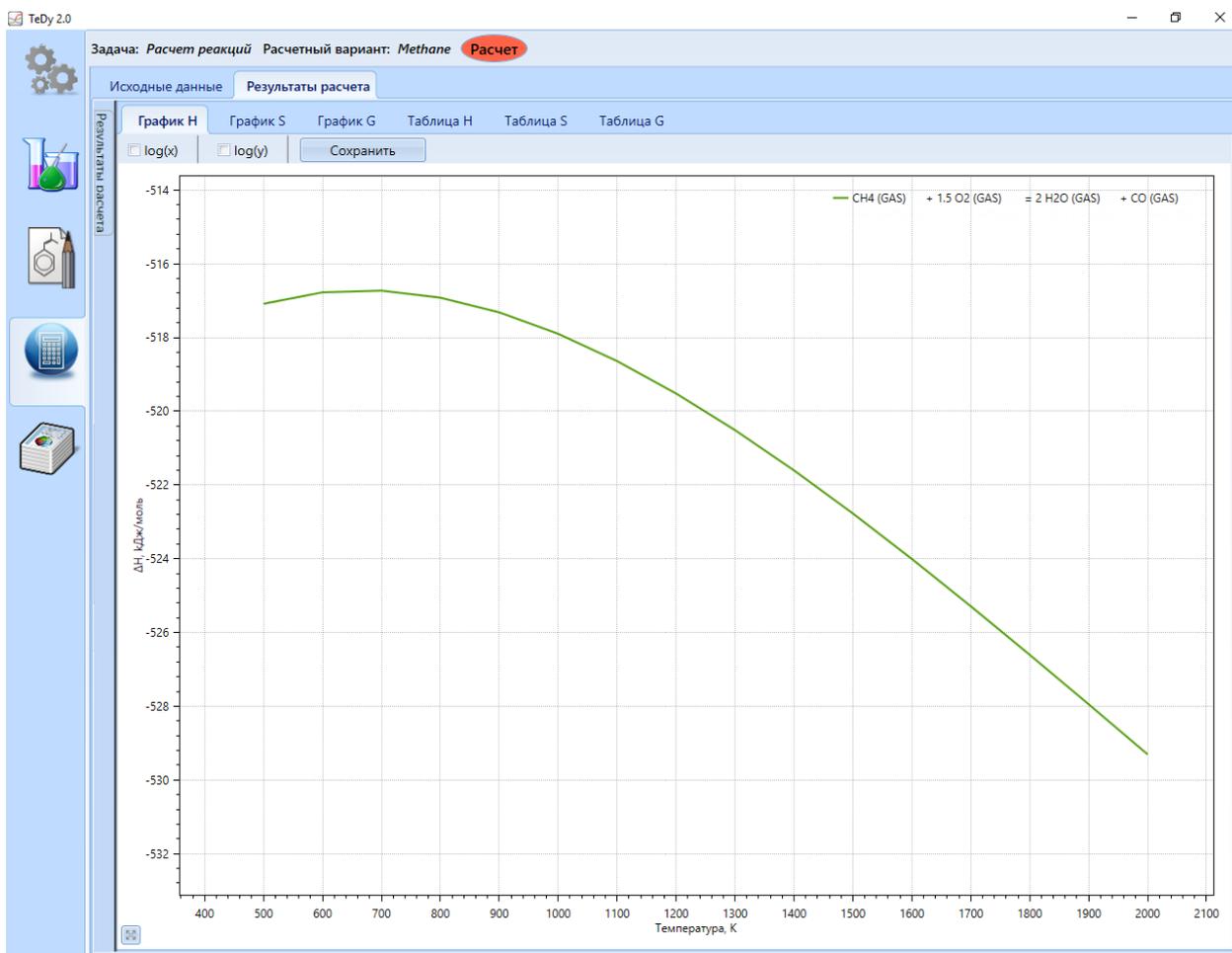


Рисунок 26 – Вид страницы графического отображения результатов расчета изменения термодинамических функций по реакции

Также результаты расчета представляются в виде таблицы. Для графиков реализована функция сохранения в графический файл, а для таблицы – в Microsoft Excel.

Список использованных источников

1. Пешкичев И.В., Макеева И.Р., Шульц О.В. [и др.] // Программный комплекс TeDu для решения задач термодинамического моделирования. Вестник ЮУрГУ ММП, 2018. Т.11, №1. С. 84-94. DOI: 10.14529/mmp180108
2. Barin I. // Thermochemical Data of Pure Substances. Third Edition, VCH Publishers, Inc., New York, NY (USA). DOI:10.1002/9783527619825
3. Глушко В.П., Гурвич Л.В., Бергман Г.А. [и др.] // Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в четырех томах. М.: Наука, 1982.
4. Пешкичев И.В., Бочкарева А.А., Куропатенко В.Ф. [и др.] // Термодинамический анализ карботермического синтеза (U, Pu)N // Радиохимия, 2019, т.61, №5, с. 381–385. DOI: 10.1134/S0033831119050046
5. Шульц О.В. Оценка термодинамических свойств химических соединений на основе количественных соотношений структура–свойство // Журнал физической химии, 2019, т.93, №7, с. 963–970. DOI: 10.1134/S0044453719070264