

ПРОГРАММНОЕ СРЕДСТВО TEDY 2.0 ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ СИСТЕМ

И. В. Пешкичев, О. В. Шульц

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

Термодинамическое моделирование многокомпонентных многофазных систем используется для исследования и анализа поведения физико-химических систем на основе данных о химически равновесных составах. Для решения задач термодинамического моделирования в РФЯЦ – ВНИИТФ разрабатывается программное средство TeDu [1, 2]. Программное средство TeDu 2.0 имеет модульную архитектуру, и включает в себя четыре программных модуля, каждый из которых предназначен для решения отдельного типа задач. TeDu 2.0 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) [3]. База данных программного средства обеспечивает хранение, просмотр и извлечение данных о термодинамических свойствах веществ и других данных, необходимых для расчетов [4].

Программное средство успешно применяется для моделирования радиохимических технологий замкнутого ядерного топливного цикла, например, при разработке термодинамической модели карбо-термического синтеза монокридов урана и плутония [5], при моделировании процессов волоксида-ции отработавшего ядерного топлива [6], коррозионной активности топливной соли жидко-солевого реактора [7].

Литература

1. Пешкичев, И. В. Программный комплекс TeDu для решения задач термодинамического моделирования [Текст] / И. В. Пешкичев, И. Р. Макеева, О. В. Шульц и др. // Вестник ЮУрГУ. Сер. «ММП». – 2018. – Т. 11, № 1. – С. 84. – DOI: 10.14529/mmp180108.
2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ: № 2021613475.
3. Шульц, О. В. Оценка термодинамических свойств химических соединений на основе количественных соотношений структура–свойство [Текст] // Журнал физической химии. – 2019. – Т. 93, № 7. – С. 963. – DOI: 10.1134/S0044453719070264.
4. Peshkichev, I. V. Comparison of databases on thermodynamic properties of individual substances [Text] / I. V. Peshkichev, I. R. Makeyeva // Radiochemistry. – 2023. – Vol. 65, No. 1. – P. 28. – DOI: 10.1134/S1066362223010046.
5. Peshkichev, I. V. Thermodynamic analysis of the carbothermal synthesis of (U, Pu)N [Text] / I. V. Peshkichev, A. A. Bochkareva, V. F. Kuropatenko et al. // Radiochemistry. – 2019. – Vol. 61, No. 5. – P. 535. – DOI: 10.1134/S1066362219050047.
6. Шульц, О. В. Термодинамическое моделирование упрощенной переработки ОЯТ РБМК [Текст] / О. В. Шульц, И. В. Пешкичев, Н. Д. Дырда // XII научный семинар «Моделирование технологий ядерного топливного цикла»: сб. тезис. – Снежинск: РФЯЦ – ВНИИТФ, 2024. – С. 33.
7. Шульц, О. В. Термодинамическое моделирование коррозионной активности топливной соли ЖСР и анализ возможностей ее регулирования [Текст] / О. В. Шульц, М. Н. Белоногов // X Российская конференция с международным участием «Радиохимия-2022»: сб. тезис. – Санкт-Петербург: Адмирал Принт, 2022. – С. 331.