**ДВА ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСА ТЕРМОЦЕНТРА ИМ. В.П. ГЛУШКО**

Аристова Н.М.\*, Белов Г.В.\*,\*\*, Горохов Л.Н.\*, Гусаров А.В.\*, Куликов А.Н.\*, Осина Е.Л.\*

*\*)Объединенный институт высоких температур РАН, Россия,* ***125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2***

*\*\*)Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Россия,*

*119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет, e-mail: gbelov@yandex.ru*

В Термоцентре им. В.П. Глушко разработан программный комплекс Thermotool для расчёта термодинамических свойств газообразных веществ на основе информации о молекулярных постоянных и термохимических характеристиках реакций. В состав программного комплекса входят расчётные модули, база данных и модуль для работы с данными, обеспечивающий поиск, просмотр, ввод, редактирование, удаление и т.д. Комплекс предназначен для работы в среде Windows. При разработке модулей были использованы методы и алгоритмы, созданные в процессе работы над справочным изданием [1].

Модуль АТОМ предназначен для расчёта термодинамических функций атомов и атомарных ионов, модуль ДИАТОМ – для расчёта функций двухатомных молекул и их ионов, модуль ПОЛИАТОМ - для расчёта функций многоатомных молекул и их ионов. Модуль COND – предназначен для обработки информации о термодинамических свойствах веществ в конденсированном состоянии.

Результатом работы каждого из четырёх модулей является таблица термодинамических функций (теплоёмкости, энтропии, приведённой энергии Гиббса, изменения энтальпии, логарифма константы равновесия), рассчитанная в заданном температурном интервале с выбранным шагом.

Модуль обработки табличных данных позволяет рассчитать коэффициенты полинома, аппроксимирующего температурную зависимость теплоёмкости. Специально разработанный алгоритм позволяет определить оптимальный способ разбиения данных таблицы на отдельные температурные интервалы, обеспечивая выполнение условий гладкости и непрерывности функций в узлах стыковки интервалов.

Программный комплекс снабжён средствами визуализации табличных данных, что обеспечивает удобство работы с исходными данными и результатами промежуточных и окончательных расчётов.

На основе анализа информации, необходимой для проведения расчётов и получаемой в результате вычислений, разработана информационная модель, которая была использована при создании базы данных. В базе данных содержатся сведения о молекулярных постоянных – энергетических характеристиках и структурных параметрах частиц (молекул, отдельных атомов, атомарных и молекулярных ионов, электронного газа), термохимические характеристики – энтальпия образования, тепловой эффект реакции диссоциации (атомизации, ионизации), вычисленные значения термодинамических функций, а также информация о погрешностях термодинамических свойств. База данных содержит около 30 таблиц, в которых хранятся характеристики примерно 300 параметров частиц (атомов и молекул). При разработке базы данных была использована клиент-серверная СУБД Firebird ([www.ibphoenix.com](http://www.ibphoenix.com)), которая относится к классу open-source и является свободно распространяемой.

Методы равновесной термодинамики длительное время успешно используются для исследования различных процессов, связанных с химическими превращениями, и создания новых технологий. Для того, чтобы обеспечить возможность моделирования на компьютере различных термодинамических систем, было разработано специальное программное обеспечение, предназначенное для работы в среде Windows, [2-4]. Особое внимание при разработке программного комплекса было уделено созданию интерфейса пользователя, который должен быть понятным и удобным в работе.

Важнейшей и неотъемлемой частью любого программного комплекса, предназначенного для такого моделирования, является база данных о термодинамических и термохимических свойствах индивидуальных веществ. В настоящее время база данных ИВТАНТЕРМО содержит информацию о свойствах примерно 3400 веществ, образованных 96 химическими элементами.

Помимо базы данных в состав ИВТАНТЕРМО входят 6 программ, которые обеспечивают

* просмотр, редактирование и анализ информации, содержащейся в базе данных;
* расчет равновесного состава и параметров равновесного состояния сложных химически реагирующих систем;
* расчет теплового и материального баланса между группой исходных веществ и группой продуктов реакции, если известны их температура и количество;
* расчет коэффициентов аппроксимирующего полинома;
* представление результатов моделирования в виде, удобном для исследователя.

Обширная база данных по газообразным соединениям позволяет проводить расчеты равновесного состава газовой фазы практически любого сколь угодно сложного состава, включая вредные выбросы соединений азота, серы, мышьяка, селена и др.

В сочетании с базой данных по конденсированным веществам, включающей оксиды, сульфиды, галогениды и др. соединения, это дает возможность осуществлять термодинамическое моделирование различных окислительно-восстановительных пирометаллургических процессов.

Важной особенностью такого моделирования является возможность учета образования не только самостоятельных конденсированных фаз, но и их растворов. Комплекс позволяет осуществлять расчеты при сосуществовании до 400 конденсированных фаз, две из которых могут быть растворами. Таким образом, возможно термодинамическое моделирование процессов в системах металл-шлак, штейн-шлак и др.

Возможность автоматического, пошагового изменения любой из переменных, определяющих термодинамическое равновесие (температура, давление, концентрации исходных веществ и др.), значительно упрощает процедуру моделирования, а специальная подпрограмма позволяет визуализировать результаты расчетов в наиболее удобной для анализа графической форме.

Широкие возможности проведения разнообразных термохимических и термодинамических расчетов делают комплекс ИВТАНТЕРМО для Windows полезным рабочим инструментом инженера-технолога, инженера-исследователя, инженера-эколога и др. при решении многих технологических и исследовательских задач в области металлургии, в частности при создании и совершенствовании экологических и ресурсосберегающих технологий и процессов.

Программный комплекс используется для решения научных и технических задач, а также в учебном процессе в десятках организаций России и за ее пределами, в частности, в РНЦ «Курчатовский институт», МГУ им. М.В. Ломоносова, МИСиС, ИМЕТ РАН, и т.д.

Работа выполнена при финансовой поддержке по Программе фундаментальных исследований ПРАН по стратегическим направлениям развития науки  №1 "Фундаментальные проблемы математического моделирования" (коорд. ак. Бетелин В.Б.).

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ*. М.: Наука, 1982.

2. G.V. Belov, V.S. Iorish, V.S. Yungman. *CALPHAD*. **23** (1999) 173.

3. Г.В. Белов, В.С. Иориш, В.С. Юнгман. *Теплофизика высоких температур*. **38** (2000) 191.

4. Г.В. Белов. *Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы*. М.: Научный Мир, 2002.