

*Оригинальная статья*

УДК 004.942

## ИНСТРУМЕНТАЛЬНАЯ СИСТЕМА РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ, ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И СЛОЖНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ГЕТЕРОГЕННОЙ СИСТЕМЫ

**И. А. Рыбенко, П. А. Сеченов**

Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

**Аннотация.** Представлена программная реализация инструментальной системы расчета термодинамических функций индивидуальных веществ, химических реакций и равновесного состояния сложной многокомпонентной гетерогенной системы. Приведен обзор существующих баз данных и программных продуктов. Рассмотрен алгоритм расчета основных термодинамических функций вещества (удельной теплоемкости, энтальпии, энтропии и приведенной энергии Гиббса для фиксированной температуры и изменения в интервале температур). Создана база данных для 2500 индивидуальных веществ. Разработан блок расчета для определения основных термодинамических параметров. Программно реализован алгоритм расчета изменения термодинамических функций химических реакций на основе закона Гессе. Рассмотрен метод расчета равновесного состояния сложной многокомпонентной гетерогенной системы на основе принципа максимума энтропии, который реализован в третьем модуле инструментальной системы.

**Ключевые слова:** термодинамические функции, индивидуальное вещество, химическая реакция, сложная многокомпонентная гетерогенная система, термодинамическое равновесие, база данных, алгоритм расчета, инструментальная система

**Для цитирования:** Рыбенко И.А., Сеченов П.А. Инструментальная система расчета термодинамических функций индивидуальных веществ, химических реакций и сложной многокомпонентной гетерогенной системы // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2022. № 3 (41). С. 18 – 27.

*Original article*

## INSTRUMENTAL CALCULATION SYSTEM THERMODYNAMIC FUNCTIONS OF INDIVIDUAL SUBSTANCES, CHEMICAL REACTIONS AND COMPLEX MULTICOMPONENT HETEROGENEOUS SYSTEM

**I. A. Rybenko, P. A. Sechenov**

Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass, 654007, Russian Federation)

**Abstract.** A software implementation of an instrumental system for calculating the thermodynamic functions of individual substances, chemical reactions and the equal state of a complex multicomponent heterogeneous system is presented. An overview of existing databases and software products is provided. An algorithm for calculating the basic thermodynamic functions of a substance (specific heat capacity, enthalpy, entropy and reduced Gibbs energy for both a fixed temperature and a change in the temperature range) is considered. A database has been created for 2500 individual properties. A calculation block has been developed to determine the basic thermodynamic parameters. An algorithm for calculating changes in the

thermodynamic functions of chemical reactions based on Hesse's law is implemented programmatically. The method of calculating the equilibrium state of a complex multicomponent heterogeneous system based on the principle of maximum entropy, which is implemented in the third module of the instrumental system, is considered.

**Keywords:** thermodynamic functions, individual substance, chemical reaction, complex multicomponent heterogeneous system, thermodynamic equality, database, calculation algorithm, instrumental system

**For citation:** Rybenko I.A., Sechenov P.A. Instrumental system for calculating thermodynamic functions of individual substances, chemical reactions and a complex multi-component heterogeneous system. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2022, no. 3 (41), pp. 18 – 27. (In Russ.).

### **Введение**

Термодинамическое моделирование технологических процессов возможно только при использовании современных инструментальных систем. В настоящее время создано уже несколько сотен алгоритмов и программ, предназначенных для расчета равновесного состава химически реагирующих систем. Причины создания такого количества инструментальных программ связаны с существованием множества различных термодинамических систем, имеющих свои конкретные особенности, и соответствующих им большим числом термодинамических моделей. Для определения параметров моделей необходимо располагать достоверными экспериментальными и теоретическими данными.

Передовые научно-исследовательские центры по изучению термодинамических свойств веществ занимаются экспериментальным определением свойств веществ, а также закономерностей, дающих возможность прогнозировать свойства неизученных объектов. К таким центрам относятся термоцентр имени В.П. Глушко РАН (Россия) [1 – 5], национальное управление по авиации и исследованию космического пространства NASA (США), национальный институт стандартов и технологий NIST (США) [6], центр исследований в области вычислительной термодинамики CRCT (Франция, Канада, Германия), японское общество калориметрии и термического анализа Kagaku Gijutsu-Sha (Япония) и многие другие центры.

Существенной и неотъемлемой частью любого программного комплекса, предназначенного для термодинамического моделирования, является база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ

Выделим два наиболее полных справочника (базы данных) по термодинамическим свойствам веществ [1, 2]. В России одним из ведущих является термоцентр им. В.П. Глушко. По термодинамическим свойствам веществ издано восемь томов [3], а также два тома доступны на сайте [4]. Существует электронная версия в виде отсканированных страниц, а также и электрон-

ные базы данных [5], взятые из справочников [3, 4]. К иностранным разработкам следует отнести справочник по термодинамическим и теплофизическим свойствам веществ, количество которых составляет более 6000, разработанный национальным институтом стандартов и технологий США (NIST) [6].

Существуют программы (базы данных термодинамических параметров индивидуальных веществ), которые не обновляются, например NASA CEA [7], написанная на языке Fortran, с последним обновлением от 2003 г., IVTANTHERMO – термоцентр имени В.П. Глушко (последнее обновление происходило в 2003 г.). Также существуют платные актуальные программы с демонстрационной версией (FactSage [8, 9], Thermo-Calc [10, 11] и HSC Chemistry [12]).

Несмотря на многообразие программ расчета термодинамического равновесия, большинство из них имеют узкую область применения [13] и могут быть использованы только для конкретного типа задач в определенной области знаний (термодинамическая база данных для сталей с высоким содержанием марганца) [14]. К универсальным программам следует отнести лишь программные комплексы IVTANTHERMO, REAL и TERPA.

Была поставлена задача разработки базы данных и программы расчета термодинамических свойств индивидуальных веществ, химических реакций и сложных многокомпонентных гетерогенных систем с использованием справочников [3, 4]. В качестве среды разработки выбрана Visual Studio 2022, объектно-ориентированный язык программирования C#.

### **Термодинамические свойства индивидуальных веществ**

В первом модуле инструментальной системы осуществляется расчет термодинамических функций индивидуальных веществ. Исходными данными для расчетов являются коэффициенты аппроксимационного уравнения для приведенной энергии Гиббса и температуры фазовых переходов. Для каждого вещества на основе коэффициентов приведенной энергии Гиббса и эн-

тальпии образования рассчитываются остальные термодинамические функции индивидуальных веществ.

Стандартная приведенная энергия Гиббса вычисляется по следующей формуле:

$$F(T) = \frac{-(G(T) - H(0))}{T} = f_0 + f \ln X + \frac{f_{-2}}{X^2} + \frac{f_{-1}}{X} + f_1 X + f_2 X^2 + f_3 X^3, \quad (1)$$

где  $G(T)$  – энергия Гиббса, Дж/(моль·К);  $H(0)$  – энтальпия при температуре 0 К, Дж/(моль·К);  $X = T/10000$  – приведенная температура, К;  $T$  – температура, К.

На основе уравнения (1) определяются следующие термодинамические функции (удельная теплоемкость, энтропия и изменение энтальпии):

$$C_p(T) = c_0 + \frac{c_{-2}}{X^2} + c_1 X + c_2 X^2 + c_3 X^3, \quad (2)$$

$$S(T) = s_0 + s \ln X + \frac{s_{-2}}{X^2} + s_1 X + s_2 X^2 + s_3 X^3, \quad (3)$$

$$\frac{H(T) - H(0)}{T} = h_0 + \frac{h_{-2}}{X^2} + \frac{h_{-1}}{X} + h_1 X + h_2 X^2 + h_3 X^3. \quad (4)$$

Коэффициенты уравнений (2) – (4) рассчитываются на основе уравнения для приведенной энергии Гиббса:

$$\begin{array}{lll} c_0 = f; & s_0 = f_0 + f; & h_0 = f; \\ c_{-2} = 2f_{-2}; & s_{-2} = -f_{-2}; & h_{-2} = -2f_{-2}; \\ c_1 = 2f_1; & s_1 = 2f_1; & h_{-1} = -f_{-1}; \\ c_2 = 6f_2; & s_2 = 3f_2; & h_1 = f_1; \\ c_3 = 12f_3. & s_3 = 4f_3. & h_2 = 2f_2; \\ & & h_3 = 3f_3. \end{array}$$

На основании приведенных выше теплофизических функций определяется энтальпия, изобарно-изотермический потенциал, полные внутренняя энергия и энтальпия при произвольной температуре:

$$H(T) = H(0) + \frac{h_{-2}}{X^2} + \frac{h_{-1}}{X} + h_1 X + h_2 X^2 + h_3 X^3 T; \quad (5)$$

$$G(T) = H(0) - F(T)T; \quad (6)$$

$$U = H(T) - H(0) - nRT; \quad (7)$$

$$I(T) = \Delta_f H^\circ(298) + H(T) - H(0), \quad (8)$$

где  $n$  – количество вещества, моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $\Delta_f H^\circ(298)$  – энтальпия образования вещества при температуре 298 К, Дж/моль.

Расчет вышеперечисленных функций реализован в программном модуле «Термодинамические свойства индивидуальных веществ». База данных программы содержит информацию по термодинамическим параметрам более 2500 веществ. По формуле вещества, вводимого в поле «Имя индивидуального вещества», отображается следующая информация: энтальпия образования вещества и молярная масса, а для выбранного значения температуры рассчитываются удельная теплоемкость, приведенная энергия Гиббса, энтропия и изменение энтальпии. На рис. 1 представлена диаграмма классов взаимодействия. Интерфейс программы приведен на рис. 2.

В программе выделены следующие классы: «Основная форма», «Расчет», «Таблица», «Свойства». В классе «Расчет» реализован алгоритм расчета термодинамических функций вещества (приведенной энергии Гиббса, удельной теплоемкости, энтропии, энтальпии, полной энергии, внутренней энергии, изменения энтальпии, энергии Гиббса и др.). Класс «Основная форма» взаимодействует с формой «Отображения значений коэффициентов приведенной энергии Гиббса», а также с формой «Таблица», в которой отображаются основные термодинамические функции. Также в программе реализован модуль отображения информации в виде графика (рис. 3) и таблицы (рис. 4).

### Термодинамические функции химических реакций

В следующем блоке программно-инструментальной системы осуществляется расчет термодинамических функций химических реакций. Расчет основан на законе Гесса. Все параметры определяются как разность между термодинамическими функциями продуктов реакций и исходных веществ с учетом стехиометрических коэффициентов.

Изменение удельной теплоемкости химической реакции рассчитывается по следующей формуле:

$$\begin{aligned} \Delta C_{P1} &= \sum_i C_{P_i,1}^{\text{прод}} - \sum_j C_{P_j,1}^{\text{исх}} \nu_j; \\ &\dots \\ \Delta C_{Pk} &= \sum_i C_{P_i,k}^{\text{прод}} - \sum_j C_{P_j,k}^{\text{исх}} \nu_j. \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\Delta C_{P1}, \dots, \Delta C_{Pk}$  – изменение теплоемкости химической реакции при постоянном давлении в

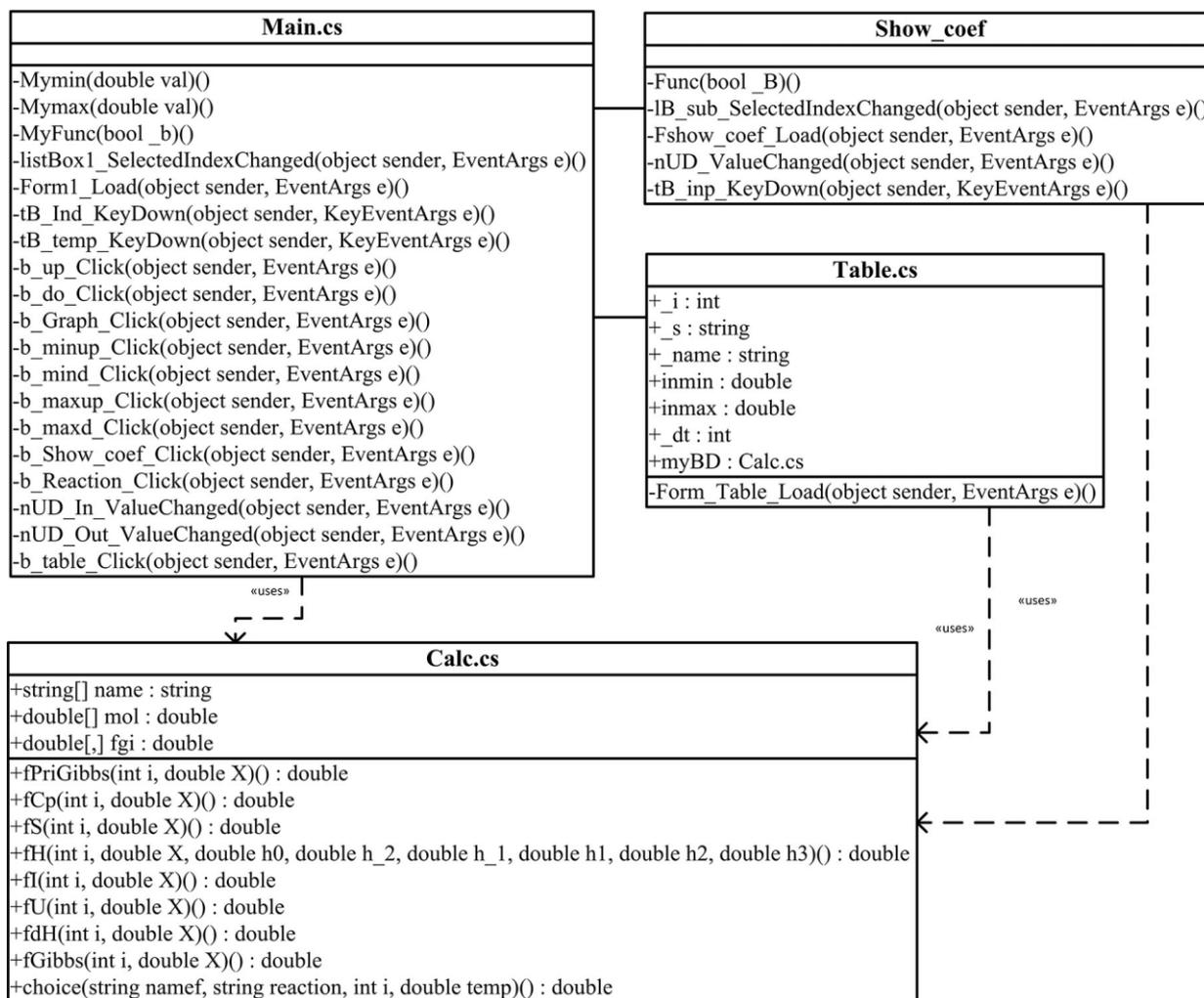


Рис. 1. UML диаграмма взаимодействия классов  
 Fig. 1. UML diagram of class interaction

интервале температур, кДж/(моль·К);  $k$  – номер фазового перехода с учетом фазовых переходов всех веществ, участвующих в реакции;  $C_{p1}^{prod}, C_{p2}^{prod}, C_{pk}^{prod}$  и  $C_{p1}^{isx}, C_{p2}^{isx}, C_{pk}^{isx}$  – теплоемкости продуктов реакций и исходных веществ со-

ответственно до 1-го, 2-го и после  $k$ -го фазовых переходов в интервале температур от 298 К до  $T$  для всех реагирующих веществ, кДж/(моль·К);  $\nu_i, \nu_j$  – стехиометрические коэффициенты.

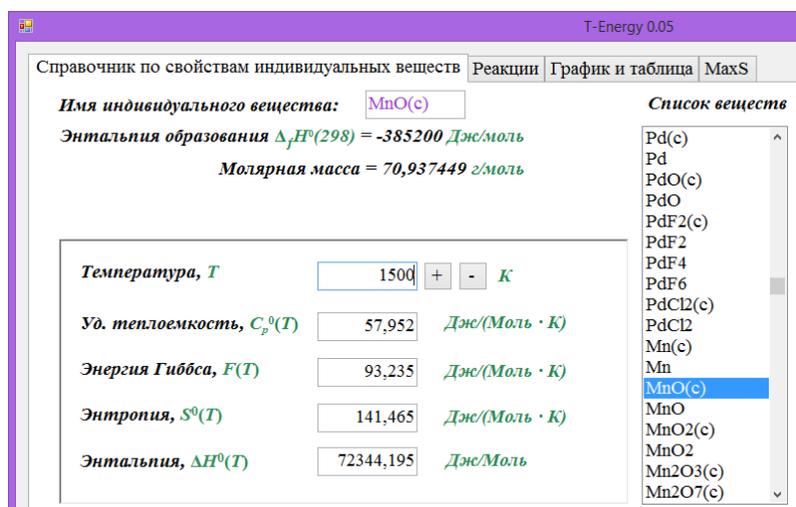


Рис. 2. Интерфейс справочника по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ  
 Fig. 2. Interface of the handbook on thermodynamic properties of individual substances

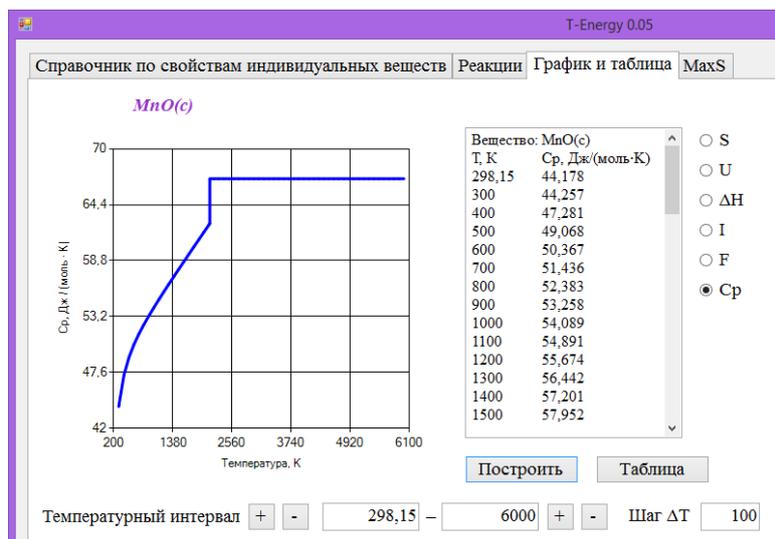


Рис. 3. Графическое отображение термодинамических функций вещества в интервале температур  
 Fig. 3. Graphical representation of thermodynamic functions of a substance in the temperature range

Изменение энтальпии  $\Delta H_T^\circ$ , кДж/моль, химической реакции при температуре  $T$  рассчитывается по следующей формуле:

$$\Delta H_T^\circ = \sum_i \Delta_f H_{298_i}^{\text{опрод}} \nu_i - \sum_j \Delta_f H_{298_j}^{\text{оисх}} \nu_j + \int_{298}^{T_{\text{ф.п1}}} \Delta C_{p1} dT + \Delta H_{\text{ф.п1}} + \int_{T_{\text{ф.п1}}}^{T_{\text{ф.п2}}} \Delta C_{p2} dT + \Delta H_{\text{ф.п2}} \dots + \int_{T_{\text{ф.пк}}}^T \Delta C_{pk} dT, \quad (10)$$

где  $T_{\text{ф.п1}}$ ,  $T_{\text{ф.п2}}$ ,  $T_{\text{ф.пк}}$  – температуры фазовых переходов, К;  $\Delta H_{\text{ф.п1}}$ ,  $\Delta H_{\text{ф.п2}}$ ,  $\Delta H_{\text{ф.пк}}$  – изменение энтальпий в результате фазовых переходов, кДж/моль;  $\Delta_f H_{298}^{\text{опрод}}$  и  $\Delta_f H_{298}^{\text{оисх}}$  – энтальпии образования продуктов и исходных веществ реакции при стандартной температуре, кДж/моль.

Интерфейс модуля для работы с химическими реакциями приведен на рис. 5. Перед расчетом термодинамических параметров обязательно проходит проверка на соответствие количества

моль входных веществ и продуктов реакций [13]. Также для удобства пользователя реализована возможность сохранения в текстовый файл химических реакций. Это позволит в дальнейшем быстро найти и загрузить химическую формулу по ее части, например, по одному из веществ.

Алгоритм для расчета термодинамических функций химических реакций следующий:

- 1 – создание двух одномерных массивов для исходных веществ и продуктов реакции;
- 2 – проверка наличия введенных веществ в базе данных;
- 3 – при успешном выполнении второго пункта, создание двумерных массивов исходных веществ и продуктов реакции для запоминания значений выбранной термодинамической функции и количества молей веществ;
- 4 – определение суммы термодинамических функций для исходных веществ и продуктов реакции с учетом количества молей веществ;

Таблица								
Т К	Вещество: MnO(c)		S°(Т)		G°(Т)		H°(Т)	
	Ср (Т) Дж/(К·Моль)	Ф°(Т) Дж/(К·Моль)	Ср (Т) Дж/(К·Моль)	Н°(Т) - Н°(0) Дж/Моль	С°(Т) Дж/(К·Моль)	Н°(Т) Дж/Моль		
298,15	44,178	28,951	58,851	8914,000	-393831,725	-376286,000		
300,00	44,257	29,136	59,124	8996,475	-393940,853	-376203,525		
400,00	47,281	38,343	72,318	13589,840	-400537,366	-371610,160		
500,00	49,068	46,247	83,074	18413,195	-408323,623	-366786,805		
600,00	50,367	53,160	92,139	23387,540	-417096,069	-361812,460		
700,00	51,436	59,301	99,986	28479,018	-426711,029	-356720,982		
800,00	52,383	64,829	106,917	33670,700	-437062,821	-351529,300		
900,00	53,258	69,856	113,138	38953,182	-448070,799	-346246,818		
1000,00	54,089	74,472	118,792	44320,820	-459671,540	-340879,180		
1100,00	54,891	78,740	123,985	49770,024	-471813,915	-335429,976		
1200,00	55,674	82,713	128,795	55298,400	-484455,865	-329901,600		
1300,00	56,442	86,432	133,282	60904,290	-497562,202	-324295,710		
1400,00	57,201	89,931	137,493	66586,511	-511103,057	-318613,489		
1500,00	57,952	93,235	141,465	72344,195	-525052,769	-312855,805		
1600,00	58,697	96,368	145,229	78176,690	-539389,053	-307023,310		
1700,00	59,438	99,348	148,809	84083,499	-554092,385	-301116,501		
1800,00	60,176	102,192	152,228	90064,233	-569145,510	-295135,767		
1900,00	60,911	104,912	155,501	96118,589	-584533,080	-289081,411		
2000,00	61,644	107,521	158,644	102246,320	-600241,345	-282953,680		

Рис. 4. Полная таблица основных термодинамических функций индивидуального вещества  
 Fig. 4. Complete table of basic thermodynamic functions of an individual substance

Рис. 5. Интерфейс модуля ввода химической реакции  
 Fig. 5. Interface of the chemical reaction input module

5 – определение по закону Гесса заданной термодинамической функции химической реакции как разности между суммой термодинамических функций исходных веществ и продуктов.

Введенная исходная информация проверяется на корректность. Если реакция прошла проверку на правильность, то ее можно сохранить в файле реакций. В программе имеется возможность расчета таких термодинамических функций химических реакций, как энтропия, внутренняя энергия, энтальпия, полная энергия, энергия Гиббса и удельная теплоемкость. На этапе расчета выбранной термодинамической функции сначала происходит проверка наличия отдельных веществ в базе данных, если вещество отсутствует или написано некорректно (например, на русском языке), то программа сообщит об ошибке. Расчет значений выбранной термодинамической функции химической реакции осуществляется как для одной температуры, так и в интервале температур с заданным шагом. Пример расчета представлен на рис. 6.

#### Равновесное состояние сложной многокомпонентной гетерогенной системы

Для расчета равновесного состояния сложной многокомпонентной гетерогенной системы используется метод термодинамического моделирования, основанный на поиске экстремума термодинамического потенциала (максимума энтропии). Этот метод предоставляет уникальную возможность обобщенного описания любого высокотемпературного состояния с помощью одних только фундаментальных законов термодинамики, независимо от условий и способов достижения равновесия, и требует минималь-

ной информации о самой системе и об ее окружении.

Термодинамическая система рассматривается как совокупность отдельных подсистем (фаз и индивидуальных конденсированных веществ). В результате для сложной системы (рабочего тела) формулируется задача нахождения для заданных термодинамических условий равновесного состава компонентов, при которых термодинамический критерий (энтропия системы), представленная функцией параметров состояния, принимает экстремальное значение. Такая формулировка приводит к сложной оптимизационной задаче, для решения которой разработаны соответствующие методы и программные средства. Метод максимума энтропии позволяет оценить состав системы в условиях равновесия независимо от способов достижения равновесия и выяснить принципиальную возможность получения тех или иных веществ, выделение которых является основным при решении задачи оценки предельного конечного состояния. Метод заключается в определении максимального значения энтропии системы как функции состава и температуры при условии соблюдения закона сохранения массы ( $M_j = \text{const}$ ) и полной внутренней энергии ( $U_n = \text{const}$ ).

Термодинамическая система разбивается на более простые составляющие (подсистемы), и суммарная энтропия определяется как сумма энтропий всех подсистем (газовой фазы, конденсированных растворов и компонентов), находящихся в конденсированном состоянии и образующих самостоятельные фазы:

$$S = S_r + \sum_{p=1}^P S_p + \sum_{j=1}^{N_{in}} S_j, \quad (11)$$

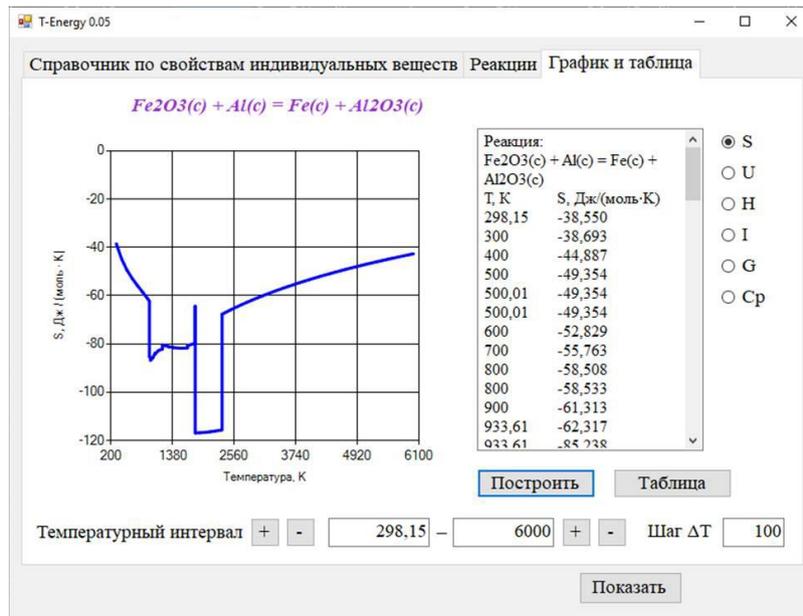


Рис. 6. Расчет изменения энтропии химической реакции в интервале температур  
 Fig. 6. Calculation of the entropy change of a chemical reaction in the temperature range

где  $S$  – полная энтропия системы, Дж/К;  $S_r$ ,  $S_p$  и  $S_j$  – энтропии газовой фазы,  $p$ -го конденсированного раствора и  $j$ -го конденсированного вещества, образующего самостоятельную фазу, Дж/К;  $N_{тв}$  – количество индивидуальных конденсированных веществ;  $P$  – количество конденсированных растворов.

Энтропия газовой фазы рассчитывается следующим образом:

$$S_r = \sum_{i=1}^{N_r} \left( S_i^\circ(T) - R_0 \ln \frac{R_0 T}{V} n_i \right) n_i, \quad (12)$$

где  $S_i^\circ(T)$  – энтропия  $i$ -го компонента газа, Дж/(моль·К);  $n_i$  – число молей  $i$ -го компонента газа;  $R_0$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $V$  – объем, м<sup>3</sup>;  $N_r$  – количество компонентов газовой фазы.

Вклад конденсированных растворов в энтропию системы представлен в виде суммы вкладов отдельных составляющих. Растворы рассматриваются как идеальные:

$$S_p = \sum_{r=1}^{N_p} (S_r^\circ(T) - R_0 \ln x_r) n_r, \quad (13)$$

где  $N_p$  – число компонентов раствора;  $x_r$  – мольная доля  $r$ -го компонента раствора;  $n_r$  – число молей  $r$ -го компонента раствора;  $S_r^\circ(T)$  – энтропия чистого  $r$ -го компонента раствора, Дж/(моль·К).

Для расчета энтропии индивидуальных веществ, представляющих собой самостоятельные фазы, используют соотношение:

$$S_j = S_j^\circ(T) n_j, \quad (14)$$

где  $n_j$  – число молей  $j$ -го вещества;  $S_j^\circ(T)$  – энтропия  $j$ -го вещества, Дж/(моль·К).

Для термодинамической системы, содержащей  $P$  растворов, газовую фазу и  $N_{тв}$  конденсированных веществ, энтропия представлена функцией состава и рассчитывается с учетом вкладов всех компонентов системы:

$$S = \sum_{i=1}^{N_r} \left( S_i^\circ(T) - R_0 \ln \frac{R_0 T}{V} n_i \right) n_i + \sum_{p=1}^P \sum_{r=1}^{N_p} \left( S_r^\circ(T) - R_0 \ln x_r \right) n_r + \sum_{j=1}^{N_{тв}} S_j^\circ(T) n_j. \quad (15)$$

Таким образом, целевая функция представляет собой зависимость энтропии сложной системы от химического состава и температуры.

Если вещества находятся только в твердом состоянии, то система из линейных уравнений и ограничений решается симплекс-методом. В большинстве случаев в выходных продуктах есть как твердые, так и газообразные вещества. Для решения без ограничений используется метод Лагранжа, который заключается в преобразовании исходных уравнений и ограничений в систему нелинейных уравнений с помощью вз-

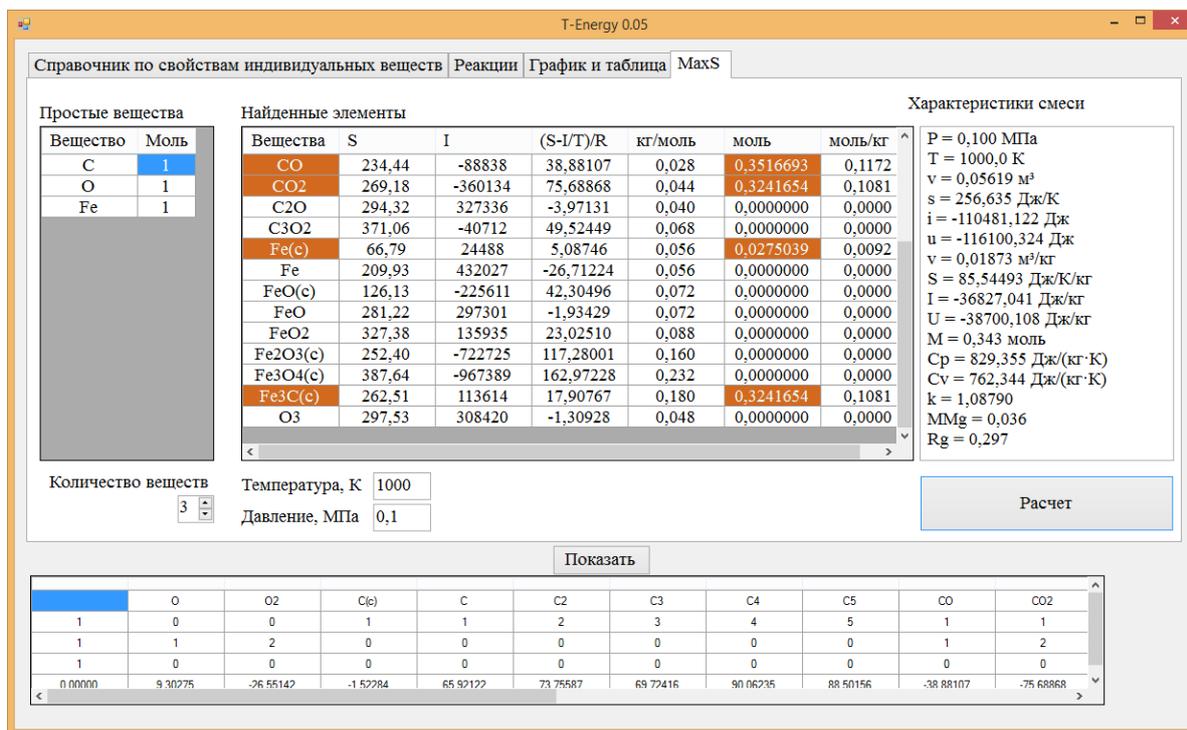


Рис. 7. Расчет равновесного состояния в системе Fe – C – O  
Fig. 7. Calculation of the equilibrium state in the Fe – C – O system

тия первой производной, как по концентрациям полученных веществ, так и по ограничениям.

Решение системы нелинейных уравнений осуществляется итерационным методом Ньютона-Рафсона. На каждой итерации осуществляется построение матрицы производных функций, а также нахождение невязок по переменным. Такой переход позволяет свести систему нелинейных уравнений к линейной системе, которая на каждой итерации решается симплекс-методом.

Для составления матрицы Якоби необходимо, чтобы исходная система уравнений имела вторую производную. Для этого в уравнениях (11) – (15) делается замена  $n_i = z_i^2$ . Следует отметить, что для нахождения максимального значения энтропии на каждой итерации для каждой неизвестной переменной:  $z_{i+1} = z_i + \Delta z_i k_i$ . Коэффициента приращения  $k_i \leq 0,1$ . При больших значениях этого коэффициента итерационный метод приходит к решению, когда выполняются ограничения и невязка стремится к нулю, а найденные значения количества молей веществ не соответствуют максимуму энтропии. Пример расчета равновесного состояния системы Fe – C – O представлен на рис. 7.

### Выводы

Разработана программа расчета термодинамических функций индивидуальных веществ, химических реакций и равновесного состояния сложной многокомпонентной гетерогенной си-

стемы. В программе реализована база данных и модуль расчета термодинамических функций для более 2500 простых веществ и соединений, который позволяет определять следующие функции: удельную теплоемкость, энергию Гиббса, энтропию, энтальпию, внутреннюю и полную энергию, как при заданной температуре, так и на интервале температур с учетом заданного шага по температуре.

С использованием этого модуля реализован блок расчета термодинамических функций химических реакций (удельной теплоемкости, энтальпии, энтропии, энергии Гиббса, внутренней энергии и полной энергии с использованием базы данных). Реализована проверка баланса количества молей исходных веществ и продуктов реакции.

В программе реализован расчет равновесного состояния сложной многокомпонентной гетерогенной системы на основе принципа максимума энтропии.

Предусмотрена возможность многовариантных расчетов в диапазоне концентраций исходных веществ и термодинамических параметров, определяющих равновесие. В программе имеются удобный интерфейс, а также возможность осуществления многовариантных расчетов и вывод результатов в виде таблицы Excel.

Базу данных и программный продукт можно использовать для термодинамических расчетов в металлургии, нефтепереработке, химической промышленности, переработке отходов и др.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баракнин В.Б., Молородов Ю.И., Станкус С.В., Федотов А.М. Информационные технологии для задач теплофизических свойств веществ // Информатика и системы управления. 2013. № 4 (38). С. 149–157.
2. Белов Г.В., Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Морозов И.В. Опыт создания теплофизических баз данных с использованием современных информационных технологий (обзор) // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 4. С. 615–633.
3. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. I. Кн. 1. / В.П. Глушко, Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. М.: Наука, 1978.
4. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/welcome.html> (дата обращения 14.06.2022).
5. Электронный справочник «Термодинамические свойства индивидуальных веществ» [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://twf.mpei.ac.ru/TTHB/2/OIVT/IVTANThermo/Rus/> (дата обращения 14.06.2022).
6. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://webbook.nist.gov>. (дата обращения 14.06.2022).
7. Chemical Equilibrium with Applications [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <https://www1.grc.nasa.gov/research-and-engineering/ceaweb/> (дата обращения 13.11.2021).
8. FactSage Courses [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.factsage.com/>. (дата обращения 14.06.2022).
9. Bale G.W., Bélislea E., Chartranda P. etc FactSage thermochemical software and databases // Calphad. 2016. Vol. 55. Part 1. P. 1–19. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2016.05.002>
10. Thermo-Calc Software [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <https://thermocalc.com/products/databases/> (дата обращения 14.06.2022).
11. Shi P., Engström A., Höglund L. etc. Thermo-Calc and DICTRA enhancematerials design and processing. In: Materials Science Forum. 2005. P. 475–479.
12. HSC Chemistry [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.hsc-chemistry.com/> (дата обращения 14.06.2022).
13. Desterov S.A. Thermodynamic database for multicomponent oxide systems // Chimica Techno Acta. 2018. Vol. 5. No. 1. P. 16–48.
14. Hallstedt B., Khvan A., Lindahl B., Selleby M., Shuhong Liu. PrecHiMn-4-A thermodynamic database for high-Mn steels // Calphad-computer coupling of phase diagrams and thermochemistry. 2017. Vol. 56. P. 49–57. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2016.11.006>
15. Сеченов П.А., Рыбенко И.А. Программа расчета термодинамических свойств химических реакций // Южно-Сибирский научный вестник. 2022. № 1 (41). С. 60–64.
16. Kondepudi D., Prigogine I. Modern thermodynamics: from heat engines to dissipative structures. Second edition. 2015. 523 p.

## REFERENCES

1. Barakhnin V.B., Molorodov Yu.I., Stankus S.V., Fedotov A.M. Information technologies for problems of thermophysical properties of substances. *Informatika i sistemy upravleniya*. 2013, no. 4 (38), pp. 149–157. (In Russ.).
2. Belov G.V., Erkimbaev A.O., Zitserman V.Yu., Kobzev G.A., Morozov I.V. The experience of creating thermophysical databases using modern information technologies (review). *Teplofizika vysokikh temperatur*. 2020, vol. 58, no. 4, pp. 615–633. (In Russ.).
3. Glushko V.P., Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. etc. *Thermodynamic properties of individual substances. T.I. Book 1*. Moscow: Nauka, 1978. (In Russ.).
4. *Ivtantermo database* [Electronic resource]. Available at URL: <http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/welcome.html> (accessed: 14.06.2022). (In Russ.).
5. *Electronic reference book "Thermodynamic properties of individual substances"* [Electronic resource]. Available at URL: <http://twf.mpei.ac.ru/TTHB/2/OIVT/IVTANThermo/Rus/> (accessed: 14.06.2022). (In Russ.).
6. *NIST Chemistry WebBook* [Electronic resource]. Available at URL: <http://webbook.nist.gov>. (accessed: 14.06.2022).
7. *Chemical Equilibrium with Applications* [Electronic resource]. Available at URL: <https://www1.grc.nasa.gov/research-and-engineering/ceaweb/> (accessed: 13.11.2021).
8. *FactSage Courses* [Electronic resource]. Available at URL: <https://www.factsage.com/> (accessed: 14.06.2022).
9. Bale G.W., Bélislea E., Chartranda P. etc FactSage thermochemical software and databases. *Calphad*. 2016, vol. 55, part 1, pp. 1–19. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2016.05.002>
10. *Thermo-Calc Software* [Electronic resource]. Available at URL: <https://thermocalc.com/products/databases/> (accessed: 14.06.2022).
11. Shi P., Engström A., Höglund L. etc. Thermo-Calc and DICTRA enhancematerials design

- and processing. In: *Materials Science Forum*. 2005, pp. 475–479.
12. *HSC Chemistry* [Electronic resource]. Available at URL: <https://www.hsc-chemistry.com/> (accessed: 14.06.2022).
  13. Desterov S.A. Thermodynamic database for multicomponent oxide systems. *Chimica Techno Acta*. 2018, vol. 5, no. 1, pp. 16–48.
  14. Hallstedt B., Khvan A., Lindahl B., Selleby M., Shuhong Liu. PrecHiMn-4-A thermodynamic database for high-Mn steels. *Calphad-computer coupling of phase diagrams and thermochemistry*. 2017, vol. 56, pp. 49–57. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2016.11.006>
  15. Sechenov P.A., Rybenko I.A. Program for calculating the thermodynamic properties of chemical reactions. *Yuzhno-Sibirskii nauchnyi vestnik*. 2022, no. 1 (41), pp. 60–64. (In Russ.).
  16. Kondepudi D., Prigogine I. *Modern thermodynamics: from heat engines to dissipative structures*. Second edition. 2015. 523 p.

#### Сведения об авторах

**Инна Анатольевна Рыбенко**, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой прикладных информационных технологий и программирования, Сибирский государственный индустриальный университет

**Павел Александрович Сеченов**, к.т.н., доцент кафедры прикладных информационных технологий и программирования, Сибирский государственный индустриальный университет

#### Information about the authors:

**Inna A. Rybenko**, Dr. Sci., Prof., Head of the Department of Applied Information Technologies and Programming, Siberian State Industrial University

**Pavel A. Sechenov**, Cand. Sci., Asist. Prof., Head of the Department of Applied Information Technologies and Programming, Siberian State Industrial University

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.*

*The authors declare that there is no conflict of interest.*

Поступила в редакцию 13.07.2022

После доработки 18.07.2022

Принята к публикации 25.07.2022

Received 13.07.2022

Revised 18.07.2022

Accepted 25.07.2022