

РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ РАСЧЁТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

Доломатов М.Ю.^{1,2}, Журавлева Н.А.¹, Нигматуллина А.В.¹, Танатарова Д.Р.¹,
Казаков М.А.¹

¹ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный авиационный технический университет», Уфа, Россия (450000, Уфа, ул. Карла Маркса, 12), e-mail: zhuravliova80@mail.ru

²ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет», Уфа, Россия (450000, Уфа, ул. Заки Валиди, 32), e-mail: raouf@bsu.bashedu.ru

Термодинамические расчеты являются общепринятым и важным элементом многих химических исследований. Они лежат в основе разработки высокоэффективных технологий промышленного синтеза соединений, процессов переработки нефти и твердых топлив, выбора оптимальных путей использования сырьевых ресурсов. Разработана информационная система, автоматизирующая процесс расчета термодинамических функций при различных условиях внешней среды, позволяющая сократить время, издержки и трудозатраты в процессе выполнения расчетов. В настоящее время существует справочная литература, содержащая таблицы основных термодинамических свойств, как в бумажном виде, так и в электронном (базы данных). Также существуют информационные системы расчета термодинамических функций, имеющих ряд недостатков. Разработанная АИС расчета термодинамических функций позволяет устранить имеющиеся недостатки и автоматизировать различные методики расчета термодинамических функций при различных свойствах внешней среды. Программа выполнена в среде Delphi 7 и позволяет вести базу данных.

Ключевые слова: информационная система, разработка, термодинамические функции.

DEVELOPMENT OF INFORMATION SYSTEM OF CALCULATION OF THERMODYNAMIC FUNCTIONS

Dolomatov M.J.^{1,2}, Zhuravleva N.A.¹, Nigmatullina A.V.¹, Tanatarova D.R.¹,
Kazakov M.A.¹

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa, Russia (450000, Ufa, street Karla Marksa, 12), e-mail: zhuravliova80@mail.ru

²Bashkir State University, Ufa, Russia (450000, Ufa, street Zaki Validi, 32), e-mail: raouf@bsu.bashedu.ru

Thermodynamic calculations are the standard and important element of many chemical researches. They are cornerstone of development of highly effective technologies of industrial synthesis of compounds, processes of oil refining and firm fuels, a choice of optimum ways of use of raw material resources. The information system is developed to automating process of thermodynamic functions calculation under various environmental conditions, allowing to reduce time, expenses and labor costs in the course of performance of calculations. At present there are the reference books containing tables of the main thermodynamic properties as in paper form, and in electronic (databases). Also there are information systems of calculation of the thermodynamic functions having a number of shortcomings. Developed information system of calculation of thermodynamic functions allows to eliminate available defects and to automate various method of calculation of thermodynamic functions at various properties of environment. The program is executed in the Delphi 7 and allows to conduct a database.

Keywords: information system, development, thermodynamic functions.

В работе разрабатывается автоматизированная информационная система расчета термодинамических свойств соединений при различных условиях внешней среды.

Термодинамические расчеты являются общепринятым и важным элементом многих химических исследований. Они лежат в основе разработки высокоэффективных технологий промышленного синтеза соединений, процессов переработки нефти и твердых топлив, выбора оптимальных путей использования сырьевых ресурсов. Термодинамическое исследование процессов, приводящих к загрязнению окружающей среды, занимает важное

место при решении экологических проблем. Данные о термодинамических свойствах экотоксикантов позволяют проводить расчеты химических равновесий для различных технологических процессов и предсказывать способы предотвращения или уменьшения попадания токсичных веществ в окружающую среду. Все это делает необходимым накопление достоверной информации о термодинамических свойствах индивидуальных веществ и соединений. Авторы [10] также подчеркивают, что создание новых передовых технологий невозможно без точного знания таких основных характеристик, как свободная энергия Гиббса, энтальпия образования, теплоемкость, энтропия и др.

Термодинамические потенциалы (термодинамические функции) – характеристические функции в термодинамике, убыль которых в равновесных процессах, протекающих при постоянстве значений соответствующих независимых параметров, равна полезной внешней работе. Выделяют следующие термодинамические потенциалы: внутренняя энергия, энтальпия, свободная энергия Гельмгольца, потенциал Гиббса, большой термодинамический потенциал.

В настоящее время существует справочная литература, содержащая таблицы основных термодинамических свойств, как в бумажном виде [7, 8, 12], так и в электронном (базы данных) [1, 3-5]. Также существуют информационные системы расчета термодинамических функций [2, 9]. Недостатком существующих систем является отсутствие возможности рассчитывать свойства при различных температурах. Кроме того, предлагаемые расчеты выполняются по одной методике, поэтому нет возможности сравнивать результаты расчетов и выбирать наиболее подходящий алгоритм расчета. Значительные временные затраты на проведение расчетов, довольно скудный объем информации в базах данных по свойствам веществ при различных свойствах внешней среды также являются существенными недостатками существующих систем расчета.

Целью работы является разработка информационной системы, автоматизирующей процесс расчета термодинамических функций, в результате которой будет достигнуто сокращение времени, издержек и трудозатрат в процессе выполнения расчетов.

Задачами работы, направленными на достижение поставленной цели являются:

- анализ методик расчета термодинамических функций;
- проектирование АИС расчета термодинамических функций;
- реализация АИС расчета термодинамических функций.

В настоящее время расчет термодинамических функций проводится в рамках лабораторных исследований, а также по функциям вручную.

В качестве основных показателей, определяющих качество эксперимента, можно выделить следующие:

- чистота исследуемых веществ;
- фазовое состояние исследуемых веществ;
- соблюдение условий проведения опыта;
- методические особенности измерений;
- возможные источники случайных (инструментальных) и систематических погрешностей.

Корректность обработки полученных экспериментальных данных обусловлена адекватностью методики описания данных опыта и их обработки реальным его условиям, единством и строгостью используемых методов обработки, наличием и обоснованностью оценок погрешностей результатов, взаимосогласованностью термодинамических характеристик [11].

Экспериментальные данные о термодинамических свойствах, полученные в ходе лабораторных исследований, имеются лишь для ограниченного числа соединений и поэтому необходимо развитие и совершенствование методов прогнозирования термодинамических свойств. До недавнего времени это развитие шло, главным образом, по пути разработки эмпирических подходов, из которых можно выделить большое количество основанных на классической теории строения молекул приближенных методов расчета термодинамических свойств через их аддитивные составляющие. Значения аддитивных вкладов, получаемых из экспериментальных данных, позволяют рассчитывать термодинамические свойства неисследованных соединений. Аддитивные методы давно успешно используются в термодинамике и хорошо зарекомендовали себя, однако отсутствие экспериментальных данных, необходимых для определения аддитивных вкладов, является главным препятствием широкого распространения этих методов.

Современный уровень развития вычислительной техники и разработка новых квантово-химических методов позволяют проводить теоретические расчеты термодинамических свойств газообразных веществ с точностью, сравнимой с погрешностями экспериментальных исследований и, таким образом, накапливать достоверные данные по термодинамическим свойствам разнообразных соединений.

В последние годы, благодаря развитию аппарата методов термодинамического моделирования и расчета, в физико-химических исследованиях появилась реальная возможность заменять отсутствующие экспериментальные данные результатами, полученными из надежных теоретических расчетов. Это открывает новые перспективы развития и применения аддитивных методов прогнозирования значений термодинамических свойств. Появляется возможность установления закономерностей, связывающих термодинамические свойства веществ (энтальпия образования, энтропия, теплоемкость) с их строением для широкого круга соединений, в случаях экстремальности значений параметров

состояния, одновременного протекания ряда сложных взаимосвязанных физико-химических превращений и др., применение данного подхода становится особо ценным и позволяет надеяться на получение количественно достоверных результатов при изучении даже достаточно сложных по составу, свойствам и поведению систем. Таким образом, аддитивные методы, разработанные на основе установленных закономерностей, позволяют прогнозировать термодинамические свойства неисследованных соединений и служат расширению возможностей термодинамического моделирования разнообразных химических процессов [6].

Достоверность термодинамических свойств, полученных расчетным путем (самостоятельным или дополняющим экспериментальное изучение), может быть достигнута только при наличии достаточно адекватной и полноценной информации и зависит, в первую очередь, от того, насколько обосновано применение того или иного метода расчета, какова корректность самого метода, насколько достоверны значения его параметров (если таковые имеются), какова их погрешность.

В основу информационной системы заложены универсальные методы расчета $\Delta H^{\circ}_{об}$, S° , C°_p , ΔG°_o , $\lg K^{\circ}_{poo}$: методы замены водорода на группы CH_3 и групп на функциональные группы (метод Андерсена, Байера, Ватсона) и групповых вкладов (Бенсона), а также уравнения позволяющие рассчитывать термодинамические потенциалы углеводородов при произвольных температуре и числе С-атомов [7].

Принципиальное описание процесса в виде мнемосхемы изображено на рисунке 1. Она показывает, как проходит процесс расчета термодинамических функций на сегодняшний день.



Рисунок 1 – Мнемосхема бизнес – процесса «как есть»

Полученные учеными данные по термодинамическим функциям заносятся в хранилище данных. Эти показатели формируются путем исследований или расчета по методам. Затем данные, переданные учеными из хранилища в издательство, используются для создания справочников по термодинамическим функциям, которые затем применяются пользователями (например, работниками нефтеперерабатывающего завода) в своей деятельности.

Приведем следующую функциональную модель бизнес–процесса расчета термодинамических функций с помощью методологии IDEF0 (рисунок 2).



Рисунок 2 – Функциональная модель бизнес–процесса расчета термодинамических функций

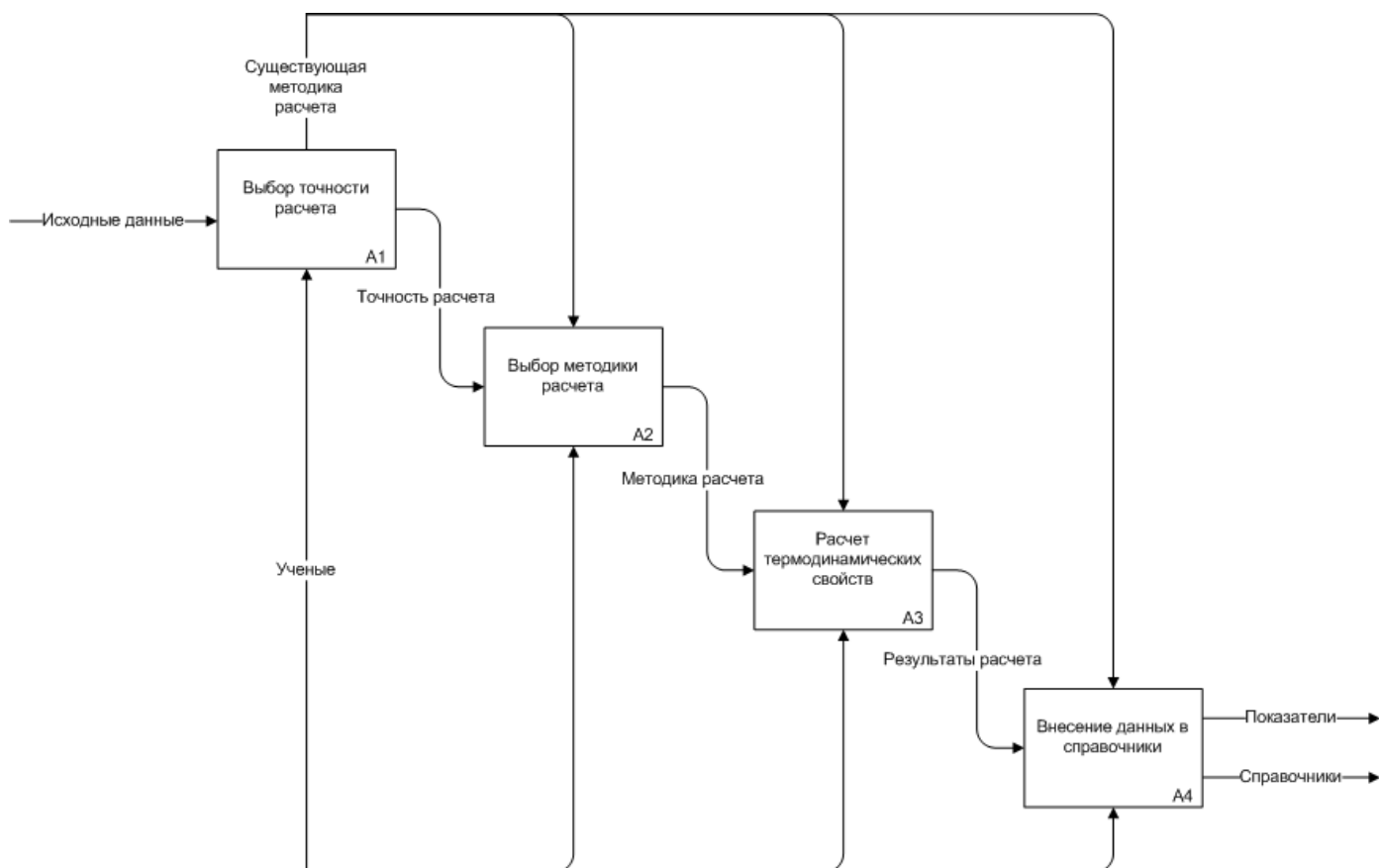


Рисунок 3 – Декомпозиция блока «Расчет термодинамических функций»

Входящие документы: исходные данные (температура, название соединения, группа соединения).

Регламентирующие документы: существующая методика расчета.

Участники бизнес-процесса: ученые.

Выходящие документы: справочники, показатели.

Далее произведем декомпозицию блока – расчет термодинамических функций (рисунок 3)

Для создания автоматизированной информационной системы в качестве языка программирования был выбран Delphi. Форма расчёта термодинамических свойств представлена на рисунке 4. Разработанная программа имеет удобный интерфейс при работе с данными. База данных программы повышает качество и скорость работы с данными.

Form1

Название соединения:
 Озон

Температура (Т, К)
 900

Добавить значения

Вычислить

Ср (Дж/моль*К)
 41

S (Дж/моль*К)
 296

H об (кДж/моль)
 151

G об (кДж/моль)
 224

lg Kр (об)
 -22

Форма 2 Выход

| | Температура, К | Ср, Дж/(моль*К) | S, Дж/(моль*К) | H, кДж/моль | G, кДж/моль | lgK |
|---|----------------|-----------------|----------------|-------------|-------------|-----|
| 1 | 300 | 39 | 238 | 142 | 162 | -28 |
| 2 | 400 | 43 | 250 | 141 | 169 | -22 |
| 3 | 500 | 47 | 261 | 141 | 176 | -18 |
| 4 | 600 | 49 | 270 | 142 | 184 | -16 |
| 5 | 700 | 51 | 277 | 142 | 190 | -14 |
| 6 | 800 | 52 | 284 | 142 | 197 | -13 |

Рисунок 4 – Интерфейс программы расчета термодинамических свойств

В результате проведенной работы была разработана автоматизированная информационная система расчета термодинамических функций по различным методикам [7]. Программа выполнена в среде Delphi 7 и позволяет вести базу данных расчета термодинамических свойств при требуемых температурах по различным методикам.

Список литературы

1. FACT databases. <http://www.crct.polymtl.ca/fact/index.php>.
2. Автоматизированная система термодинамических данных «Ивтантермо». Термоцентр Российской академии наук. <http://www.chem.msu.su/rus/chinfo/termo/>.
3. База данных «Термодинамические функции веществ». http://www.chemway.ru/bd_chem/tbl_term_func/w_tbl_term_stull.php.
4. «База термодинамическая данных 3-го тысячелетия об идеальных газах и конденсированных средах для изучения горения», Технион, Авиационный факультет (ТАЕ) доклад 867 от января 2001 года.
5. Базы данных IUPAC. Термодинамические таблицы. <http://iupac.pole-ether.fr/>.

6. Дорофеева О.В. Развитие и применение методов расчета термодинамических свойств газообразных соединений: диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук. – Москва, 2008. – 318 с.
7. Жоров Ю.М. Термодинамика химических процессов. Нефтехимический синтез, переработка нефти, угля и природного газа. – М.: Химия, 1985. – 464 с.
8. Лебедев Ю.А., Кизин А.Н., Папина Т.С., Сайфуллин И.Ш., Мошкин Ю.Е. Характеристики углеводородов (Анализ численных данных и их рекомендованные значения. Справочное издание). – М.: ЛЕНАНД (URSS), 2012. – 560 с.
9. Сайфуллин И.Ш., Лебедев Ю.А., Кизин А.Н. Методы расчета термодинамических и критических свойств углеводородов и их производных в программе TERMO v. 1.0. <http://www.neftegazavtomatika.ru/reports/id16/>.
10. Сайфуллин И.Ш., Лебедев Ю.А., Кизин А.Н. Информационные аспекты термодинамики и проблемы стандартизации и технологий, 2012. <http://www.neftegazavtomatika.ru/reports/id52/>.
11. Слободов А.А., Сибирцев В.С., Сочагин А.А., Гаврилов А.В., Мищенко Г.А. Повышение достоверности и согласованности термодинамических функций веществ на основе ортогональных представлений // Известия СПбГТИ (ТУ). – 2012. - №14. – С. 13-16.
12. Сталл Д. Вестрам Э. Зинке Г. Химическая термодинамика органических соединений. – М.: Издательство «Мир», 1971. – 806 с.

Рецензенты:

Шапиро С.В., д.т.н., профессор, зав. кафедрой физики, Уфимский государственный университет экономики и сервиса, г. Уфа.

Бахтизин Р.З., д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физической электроники и нанофизики, Башкирский государственный университет, г. Уфа.