

Объектно-ориентированный подход в вычислительной термодинамике. Библиотека TC Classes.

Белов Г.В.

Термоцентр им. В.П. Глушко, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, Россия, Ижорская 13/19,
(gbelov@iname.ru)

Введение

Принципы объектно-ориентированного программирования находят все большее применение в практике проектирования и создания сложных научно-технических информационных систем. Данный подход позволяет рассматривать реальную систему как упорядоченную совокупность объектов, которые в процессе взаимодействия друг с другом определяют ее поведение. В работе [1] приводятся примеры создания информационных систем при помощи принципов объектно-ориентированного моделирования. Использование этого подхода для создания библиотеки классов в вычислительной термодинамике представлено в работах [2, 3, 4].

Данная работа также посвящена созданию библиотеки классов, предназначенных для разработки информационных систем в области вычислительной термодинамики. Представленный набор классов не образует иерархии (все классы являются автономными), поэтому его программная реализация является достаточно простой и не требует детального описания. Основное назначение разработанной библиотеки – инкапсуляция свойств и методов некоторых полезных классов в целях сокращения программирования рутинных функций. Практическая реализация библиотеки была осуществлена с использованием языка программирования Object Pascal (Delphi).

При проектировании библиотеки были учтены рекомендации [5], в соответствии с которыми предусмотрены

- конструкторы, определяющие способы инициализации объектов данного типа;
- наборы функций доступа (по индексу и по имени);
- наборы функций-модификаторов;
- механизмы возбуждения исключений, используемые для сообщений об ошибках.

Предлагаемая реализация не претендует на полноту и не является окончательной. Тем не менее, на наш взгляд, она может оказаться полезной при разработке некоторых специализированных информационных систем. Указанная библиотека была использована при разработке информационно-справочной системы программного комплекса «Химический Верстак».

Библиотека TC Classes

Общие константы, типы и методы

```
const MaxNumberOfCoefficients = 7;      - максимальное число коэффициентов ап-  
                                         проксимирующей функции,  
const MaxNumberOfElements = 5;          - максимальное число элементов в формуле  
                                         вещества.  
Type  
TCoeff = array[1..MaxNumberOfCoefficients] of single;  
ST2 = string[2]  
ST3 = string[3];  
ST4 = string[4];  
ST8 = string[8];  
ST15 = string[15];
```

```

ST20 = string[20];
ST50 = string[50];
TNos = byte;
TQty = byte;
TEL_Nos = array[1..MaxNumberOfElements] of TNos;
TEL_Qty = array[1..MaxNumberOfElements] of TQty;
ST10 = string[10];
ST20 = string[20];

```

Методы, которые есть у всех объектов:

```

constructor Create;
destructor Destroy;

```

Класс TElement

Назначение

Содержит информацию о химическом элементе и физико-химических свойствах вещества, отвечающего стандартному состоянию элемента.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Mendeleev_No	byte	номер в периодической таблице элементов
TPX_No	byte	термохимический номер элемента
Formula	ST2	символ элемента
Standard_Formula	ST20	формула вещества, отвечающего стандартному состоянию элемента
Tmelt	double	температура плавления, К
Pmelt	double	давление, соответствующее Tmelt, атм
Tboil	double	температура кипения, К, при давлении 1 атм
Density	double	плотность
DensUnit	ST20	размерность плотности
TDense	double	температура, соответствующая Density, К
Pot_Ion	double	потенциал ионизации, эВ
Hmelt	double	энтальпия плавления, кДж/моль
Hvap	double	энтальпия испарения, кДж/моль
At_FS	byte	число атомов в молекуле вещества, отвечающего стандартному состоянию элемента
Atomic_Mass	double	атомная масса
SnucIR	double	компонент ядерного спина (отнесенный к R ₀)
Mend_Group	ST2	группа в периодической таблице элементов

Методы

Нет

Класс *TMendTab*

Назначение

Содержит информацию обо всех химических элементах.

Свойства

Нет.

Методы

Метод	Тип	Назначение
function ElementByMendNo(index: integer)	TElement	поиск по номеру вещества в периодической таблице
function ElementByTPXNo(index: integer)	TElement	поиск по термохимическому номеру элемента
function ElementByName(index: ST2)	TElement	поиск по символу элемента
function ElementByOrder(index: integer)	TElement	извлечь информацию по номеру в массиве

Физически классы TElement и TMendTab находятся в файле At_Class.pas. Проект At_objec.dpr иллюстрирует технику использования указанных классов. Приложение At_Objec.exe предоставляет возможность поиска информации о химическом элементе одним из трех способов - по номеру вещества в периодической таблице, по термохимическому номеру элемента и по символу элемента. Еще одним примером использования указанных классов является проект Mend_Tab.

Класс *TPolynom*

Назначение

Содержит численные значения коэффициентов аппроксимирующей функции приведенной энергии Гиббса, температурные пределы области ее применимости и дополнительную информацию о фазовом состоянии.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Tmin	single	нижний температурный предел применимости данного полинома
Tmax	single	верхний температурный предел применимости данного полинома
F[index : integer]	single	коэффициенты f_i функции (1), аппроксимирующей табулированные значения приведенной энергии Гиббса $F(T) = -(G(T) - H(0))/T$
Phase	ST10	дополнительная информация о фазовом состоянии

Значения приведенной энергии Гиббса при заданной температуре Т могут быть вычислены по формуле

$$F(T) = f_0 + f_1 \ln X + f_{-2}/X^2 + f_{-1}/X + f_1 * X + f_2 * X^2 + f_3 * X^3, \quad (1)$$

где $X = T/10000$, [6].

Методы

Метод	Тип	Назначение
procedure SetAllData(Tmin, Tmax: single; F : TCoeff; Phase : ST10);	-	присвоить все значению объекту типа TPolynom

Класс TPolynoms

Назначение

Содержит сведения обо всех аппроксимирующих функциях вещества и число этих функций (число температурных интервалов).

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Pol[i: integer]	TPolynom	сведения об объектах типа TPolynom
Count	integer	количество объектов в списке
Tmin	single	нижний температурный предел применимости аппроксимирующей функции
Tmax	single	верхний температурный предел применимости аппроксимирующей функции

Методы

Метод	Тип	Назначение
procedure AddPol(Tmin,Tmax: single; const F: array of single)	-	добавить сведения о новом полиноме (T_{min} , T_{max} , коэффициенты) в список
procedure Clear	-	очистить список полиномов

Класс TSpecies

Назначение

Содержит термодинамические и термохимические сведения об индивидуальном веществе, а также сведения обо всех аппроксимирующих функциях этого вещества. Позволяет рассчитывать значения теплоемкости, энтропии, энтальпии и энергии Гиббса вещества при заданной температуре.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Formula	ST20	формула вещества
State	ST20	фазовое состояние вещества
PrecClass	ST4	класс точности термодинамической информации
Name	ST50	название вещества
MolMass	double	молекулярная масса
Tref	single	стандартная температура
Reaction	ST50	реакция диссоциации (сублимации)
DHR	single	энтальпия реакции диссоциации (сублимации)
DH0	single	энтальпия образования при 0 К
DH298	single	энтальпия образования при 298.15 К
Cp298	single	теплоемкость при 298.15 К
S298	single	энтропия при 298.15 К
H298H0	single	изменение энтальпии (H(298.15) - H(0))
Snucl	single	составляющая ядерного спина
PrefUnit	ST3	единицы измерения давления для стандартного состояния
Date	ST8	дата ввода информации
Nelts	byte	количество элементов в молекуле вещества
Npols	byte	число объектов типа TPolynom
AddrPol	integer	адрес первого объекта TPolynom в базе данных
Pstate	byte	признак фазового состояния
EL_Nos[index: integer]	TNos	массив номеров элементов в периодической таблице
EL_Qty[index: integer]	TQty	массив количеств атомов каждого элемента в молекуле вещества
IonCharge	ShortInt	кратность ионизации
Polynoms	TPolynoms	список объектов типа TPolynom
isomericForm	ST10	изомерная форма
Modification	ST15	модификация

Методы

Метод	Тип	Назначение
procedure SetAllData(Formula: ST20; State: ST20; PrecClass: ST4; Name: ST50; MolMass: double; Reaction: ST50; DHR: single; DH0: single; DH298: single; Cp298: single; S298: single; H298H0: single; Snucl: single; PrefUnit: ST3; Date: ST8; Nelts: byte; Npols: byte; AddrPol: integer; Pstate: byte; EL_Nos: TEL_Nos; EL_Qty: TEL_Qty);	-	присвоить все значения объекту типа TSpecies
Procedure Clear	-	очистить/обнулить поля объекта
function Cp(T: single)	single	рассчитать теплоемкость при заданной температуре
function S(T: single)	single	рассчитать энтропию при заданной температуре
function Hfull(T: single)	single	рассчитать полную энтальпию при заданной температуре
function H(T: single)	single	рассчитать изменение энтальпии от T_{ref} до заданной температуры
function G(T: single)	single	рассчитать энергию Гиббса при заданной температуре
function F(T: single)	single	рассчитать изменение приведенной энергии Гиббса от T_{ref} до заданной температуры
function CalcMolMass	double	вычислить молекулярную массу вещества
procedure AddExPolynoms	-	добавить два экстраполяционных полиномы для расчета термодинамических свойств при $10^{30}\text{K} > T > T_{max}$ и $1\text{K} < T < T_{min}$ из условия $C_p = \text{const}$, где C_p – теплоемкости $C_p(T_{max})$ и $C_p(T_{min})$ соответственно

Расчет значений термодинамических функций производится с использованием (1) и формул, получаемых из (1) с использованием известных соотношений термодинамики. В случае изменения вида аппроксимирующей функции методы Cp(T), S(T), Hfull(T), H(T), G(T), F(T) должны быть переопределены в производных классах.

Класс TOneSpecies

Назначение

Содержит формулу вещества и его порядковый номер.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Formula	ST20	формула вещества
ix	integer	порядковый номер вещества (указывается при необходимости, например, номер записи в файле)

Методы

Нет.

Класс *TListOfSpecies*

Назначение

Содержит список формул веществ и их порядковые номера.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
List	TStringList	список формул веществ

Методы

Метод	Тип	Назначение
function SubstanceByName(index: ST20)	TOneSpecies	поиск по формуле вещества
function: SubstanceByIndex(index: integer)	TOneSpecies	поиск по номеру вещества
procedure AddSubstance(S: TOneSpecies)	-	добавить вещество в список
procedure Clear	-	очистить список

Класс *TFullList*

Назначение

Содержит в виде списка сведения о термодинамических и термохимических свойствах группы индивидуальных веществ, а также сведения обо всех аппроксимирующих функциях веществ этой группы. Позволяет рассчитывать значения термодинамических функций любого вещества из группы при заданной температуре. Возможен поиск по формуле вещества или по его порядковому номеру в списке.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Count	integer	число веществ в списке

Методы

Метод	Тип	Назначение
function SubstanceByName(index: ST20)	TSpecies	поиск по формуле вещества
function: SubstanceByIndex(index: integer)	TSpecies	поиск по номеру вещества
procedure AddSubstance(S: TSpecies)	-	добавить вещество в список
procedure Clear	-	очистить список

Класс *TReaction*

Назначение

Содержит уравнение химической реакции, список формул веществ – участников реакции, а также флаг, указывающий на необходимость расчета стехиометрических коэффициентов.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Formulas	TStrings	список формул веществ – участников реакции
Reaction	string	уравнение химической реакции
ComputeCoefficients	boolean	флаг, указывающий на необходимость расчета стехиометрических коэффициентов

Методы

Нет.

Класс *TReactions*

Назначение

Класс предназначен для хранения уравнений химических реакций, формул – участников этих реакций и сведений о термодинамических свойствах веществ, которые участвуют в реакциях. Позволяет осуществлять анализ уравнения химической реакции.

Свойства

Свойство	Тип	Назначение
Reactions	TStrings	список уравнений химических реакций
AllFormulas	TStrings	список формул – участников этих реакций и их стехиометрических коэффициентов

Методы

Метод	Тип	Назначение
procedure ParseReaction(index: integer)	-	анализ уравнения химической реакции с номером index, выборка формул веществ – участников реакции и их стехиометрических коэффициентов, анализ формул этих веществ, определение списка химических элементов и количества атомов каждого элемента в молекуле вещества, проверка баланса содержания элементов в левой и правой части уравнения реакции, расчет стехиометрических коэффициентов, если количество атомов в левой и правой частях уравнения реакции не совпадает и флаг ComputeCoefficients имеет значение TRUE. Более подробно о расчете стехиометрических коэффициентов см [7].

—

Описание классов TPolynom, TPolynoms, TSpecies, TOneSpecies, TListOfSpecies, TFullList, TReaction, TReactions находятся в файлах TC_Class.pas, TR_Class.pas.

Литература

1. Г. Буч. Объектно-ориентированный анализ и проектирование с примерами приложений на C++. – М.: «Издательство БИНОМ», 1998. – 560 с.
2. E.B. Rudnyi, G.F. Voronin. Classes and objects of chemical thermodynamics in object oriented programming. 1. A class of analytical functions of temperature and pressure, CALPHAD. 1995, v. 19, N 2, p. 189-206.
3. E.B. Rudnyi. Classes and Objects of Chemical Thermodynamics in Object-Oriented Programming. 2. A Class of Chemical Species. Second Electronic Computational Chemistry Conference, November 1995. <http://www.chem.msu.su/~rudnyi/species/welcome.html>.
4. E.B. Rudnyi. Computational Thermodynamics Library. Part 1. Modeling the Gibbs energy of multi-component solutions. Fifth Electronic Computational Chemistry Conference, November 1998. <http://www.chem.msu.su/~rudnyi/species/welcome.html>.
5. Б. Страуструп. Язык программирования C++. – М.: «Издательство БИНОМ», 1999. – 991 с.
6. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т. // Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др.-М.:Наука, 1982.
7. Степанов Н.Ф., Ерлыкина М.Е., Филиппов Г.Г. Методы линейной алгебры в физической химии. - М.: Изд-во МГУ, 1976. 360 с.