

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИИ**  
**INFORMATION TECHNOLOGY AND TELECOMMUNICATIONS**

**УДК 519.6**

**DOI: 10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112**

Оригинальная статья /Original Paper

**Численный метод и математическая модель нахождения равновесного состава термодинамической системы программного комплекса T-Energy**

**П.А. Сеченов, И.А. Рыбенко**

Сибирский государственный индустриальный университет,  
654007, г. Новокузнецк, Центральный р-н, ул. Кирова, зд. 42, Россия

**Резюме. Цель.** Целью исследования является разработка математической модели и численных методов нахождения равновесного состава термодинамической системы. **Метод.** Для нахождения равновесного состава термодинамической системы использовалось сочетание численных методов: Лагранжа, Ньютона – Рафсона и Гаусса. **Результат.** Проведен анализ существующих программных комплексов и используемых в них численных методов для расчета термодинамических систем. Разработана математическая модель, состоящая из численных методов Лагранжа (позволяет перейти от условной задачи к безусловной); Ньютона – Рафсона (приближенный метод решения нелинейной системы уравнений); Гаусса (решение линейной системы уравнений). Для сходимости метода Ньютона – Рафсона произведена замена искомых величин на их квадраты, а также для каждой величины заданы диапазоны изменения. Сравнение вычислений равновесного состава с программой Terra показывают удовлетворительные результаты. **Вывод.** Программный комплекс T-Energy позволяет рассчитывать равновесный состав для термодинамической системы.

**Ключевые слова:** численный метод, поиск максимума, нелинейные уравнения, термодинамическая система, метод Ньютона – Рафсона

**Для цитирования:** П.А. Сеченов, И.А. Рыбенко. Численный метод и математическая модель нахождения равновесного состава термодинамической системы программного комплекса T-Energy. Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. 2022; 49(4):104-112. DOI:10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112

**Numerical method and mathematical model for finding the equilibrium composition of the thermodynamic system of the T-Energy software package**

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

Siberian State Industrial University,  
42 Kirov Str., Central district, Novokuznetsk 654007, Russia

**Abstract. Objective.** The aim of the study is to develop a mathematical model and numerical methods for finding the equilibrium composition of a thermodynamic system. **Method.** To find the equilibrium composition of the thermodynamic system, a combination of numerical methods was used: Lagrange, Newton–Raphson and Gauss. **Result.** The analysis of existing software systems and numerical methods used in them for the calculation of thermodynamic systems is carried out. Based on the analysis, practical implementation attempts, it was possible to develop a mathematical model consisting of numerical Lagrange methods (allows you to move from a conditional problem to an unconditional one); Newton–Raphson (an approximate method for solving a nonlinear system of equations); Gauss (solving a linear system of equations). For the convergence of the Newton–Raphson method, the required quantities were replaced by their squares, and ranges of variation were set for each quantity. The results of comparing the calculations of the equilibrium composition with the Terra program show satisfactory results. **Conclusion.** The T-Energy software package allows you to calculate the equilibrium composition for a thermodynamic system.

**Keywords:** numerical method, maximum search, nonlinear equations, thermodynamic system, Newton–Raphson method

**For citation:** P.A. Sechenov, I.A. Rybenko. Numerical method and mathematical model for finding the equilibrium composition of the thermodynamic system of the T-Energy software package. Herald of the Daghestan State Technical University. Technical Science. 2022; 49(4): 104-112. DOI:10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112

**Введение.** Большинство технологических процессов относятся к сложным системам, для которых характерными являются многомерность, гетерогенность, нестационарность, стохастичность, нелинейность, наличие многочисленных прямых и обратных связей. Решение таких задач исследования и оптимизации требует использования аппарата математических моделей.

С использованием законов термодинамики можно решать две важные для металлургии группы задач. Первая связана с составлением энергетических балансов, вторая – с определением характеристик равновесного состояния. Обе эти задачи основаны на фундаментальных законах – первом и втором началах термодинамики.

**Постановка задачи.** На основании термодинамических расчетов при различной степени отклонения системы от равновесия и выполнении законов сохранения массы и энергии можно оценить поведение компонентов на различных стадиях технологического процесса, и, следовательно, предсказать оптимальные условия для получения продукта необходимого качества, определить наиболее экономичный способ ведения процесса.

Одним из подходов к построению термодинамических моделей является полный термодинамический анализ, позволяющий решать три взаимосвязанные задачи: нахождение термодинамических свойств отдельных компонентов системы по известному составу и значениям термодинамических функций; определение равновесного состава системы по свойствам составляющих ее компонентов; оценка фактического текущего неравновесного стационарного состояния системы и степени ее отклонения от равновесия.

**Методы исследования.** Методика термодинамического анализа равновесного состояния многокомпонентных гетерогенных систем известна давно. Важный вклад в создании замкнутой системы уравнений этой теории внесли работы Гиббса. Однако из-за сложности решения больших систем нелинейных алгебраических уравнений вручную эта методика долгое время практически не использовалась, а термодинамика процесса оценивалась по отдельным реакциям, что приводило к существенным ошибкам, особенно для сложных процессов, когда число компонентов системы достигает нескольких десятков. Только с появлением ЭВМ методика расчета сложных термодинамических систем начали использоваться достаточно широко [1 – 6].

Объектом термодинамического анализа является термодинамическая система – условно выделенная материальная область, взаимодействие которой с окружающей средой сводится к обмену веществом и энергией. Термодинамическое равновесие – это предельное состояние, к которому стремится термодинамическая система, при этом в каждой точке устанавливается термическое, механическое и химическое равновесие (происходит выравнивание температуры и давления, и все возможные химические реакции протекают до конца).

С точки зрения взаимодействия с окружающей средой можно выделить изолированные, закрытые и открытые системы. В изолированной системе нет обмена с окружающей средой веществом и энергией. Замкнутая система отличается постоянством общей массы, нет обмена с окружающей средой веществом, но возможен обмен энергией. В открытых системах, которыми являются реальные технологические объекты, происходит обмен с окружающей средой, как веществом, так и энергией. В зависимости от типа систем существует четыре подхода к расчету равновесного состояния многокомпонентной гетерогенной системы. При расчете замкнутых систем используются методы, основанные на законе действующих масс или использующие нахождение минимума изобарно-изотермического потенциала системы. Для них также применим метод равенства химических потенциалов. При расчете изолированной системы основополагающим является принцип максимума энтропии. Расчет открытых систем предполагает использование методов как равновесной, так и неравновесной термодинамики.

Исторически первыми были разработаны методы, основанные на законе действующих масс независимых реакций в системе, но в связи с большим количеством недостатков (необходимость выбора независимых реакций при составлении системы уравнений, отсутствие достоверных данных по константам равновесия для многих реакций; отсутствие универсальных теорий строения конденсированных фаз; необходимость наличия качественной предварительной оценки равновесного состояния) они не нашли широкого применения. Альтернативными константному методу являются методы, основанные на вариационных принципах термодинамики, сущность которых заключается в нахождении экстремума термодинамического потенциала системы: минимума изобарно-изотермического потенциала или максимума энтропии.

Основным условием применимости этого метода является изолированность термодинамической системы. На практике условие изолированности означает, что процессы установления равновесия протекают гораздо быстрее, чем происходят изменения на границах системы (т.е. изменения внешних по отношению к системе условий) и осуществляется обмен системы с окружением веществом и энергией. Принцип максимума энтропии для изолированной системы в равновесном состоянии может быть сформулирован следующим образом:

$$S \rightarrow S_{max} \text{ при } \sum n_i = const, U_{II} = const, V = const, \quad (1)$$

где  $U_{II}$  – полная энергия системы, кДж;  $V$  – объем, м<sup>3</sup>;  $S$  – энтропия, кДж/моль·К;  $n_i$  – количество вещества  $i$ -го компонента, моль.

Изолированность системы от окружающей среды выражается в форме законов сохранения массы и энергии. При определении параметров равновесного состояния находятся значения всех зависимых переменных, включая числа молей компонентов, при которых величина энтропии достигает максимума. При отыскании экстремума на величины искомым неизвестных налагаются ограничения, отражающие условия существования системы.

Принцип максимума энтропии применим также в большинстве случаев в системах, где реализуется неполное равновесие [7]. При неполном равновесии возможны три варианта: равновесие достигается в какой-либо части (или частях) относительно большей по размерам системы – локальное равновесие; неполное равновесие достигается вследствие разности скоростей релаксационных процессов, протекающих в системе – частичное равновесие; имеют место как локальное, так и частичное равновесие.

Для того чтобы исследовать методами равновесной термодинамики неравновесный процесс, протекающий в некоторой протяженной области, эту область разбивают на достаточно мелкие части (термодинамические системы), в каждой из которых достигается состояние равновесия, и производят расчет состава и свойств для каждой из них. На основании полученных результатов определяются характеристики процесса. Если в системе существует частичное равновесие, то при проведении расчета состава следует учитывать ограничения, обусловленные кинетическими факторами. Для этой цели можно исключить из рассмотрения часть веществ или зафиксировать их концентрации, если известно, что химические реакции с их участием не успевают пройти. В этом случае часть реакций замораживается. Основными достоинствами методики, основанной на принципе максимума энтропии [8, 9], является возможность расчета высокотемпературного равновесного состояния любой сложной многомерной гетерогенной системы на основании одних фундаментальных законов термодинамики независимо от условий и способов достижения равновесия при минимуме информации о системе.

Данный подход при моделировании сложных многокомпонентных термодинамических систем реализован в инструментальной системе T-Energy [10]. Программа содержит обширную базу данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ [11], модуль расчета термодинамических функций химических реакций [12] и модуль расчета равновесного состояния термодинамической системы на основе принципа максимума энтропии. В общем случае энтропию системы можно представить в виде суммы энтропии составляющих компонентов [7]:

$$s = \sum_{k=1}^K s_k^{(p_k)} n_k + \sum_{q=1}^Q s_q n_q = \sum_{k=1}^K \left( s_k^0 - R_0 \ln \frac{R_0 T n_k}{V} \right) n_k + \sum_{q=1}^Q s_q^0 n_q, \quad (2)$$

где  $s_k^{(p_k)}$  – энтропия  $i$ -ой компоненты газовой фазы, кДж/моль·К;  $p_k$  – парциальное давление, мПа;  $s_k$  – энтропия  $k$ -й компоненты газовой фазы при температуре  $T$  и нормальном атмосферном давлении, кДж/моль·К;  $R_0$  – универсальная газовая постоянная;  $K$  – количество компонент в газовой фазе,  $Q$  – количество компонент в конденсированной фазе;  $n$  – концентрации компонент соответствующей фазы в относительных единицах.

Решая уравнение (2) относительного полного приведенного изобарно-изотермического потенциала Гиббса

$$F = s - I / T, \quad (3)$$

где  $I$  – полная энтальпия, получаем уравнение для приведенной энергии Гиббса:

$$F = \sum_{k=1}^K F_k^0 n_k - \sum_{k=1}^K n_k \cdot \ln \left( \sum_{k=1}^K n_k \right) + \sum_{k=1}^K (n_k \cdot \ln(n_k)) + \sum_{q=1}^Q F_q^0 n_q \quad (4)$$

Это уравнение является нелинейным из-за газовой составляющей. При смешении идеальных газов, возникает парадокс Гиббса [13], который отражается в выражении (4) в виде логарифмических составляющих.

Для решения задачи поиска экстремума приведенной энергии Гиббса разработан численный метод, основанный на применении методов Лагранжа [14 – 15], Ньютона – Рафсона [16, 17] и Гаусса [18].

Метод Лагранжа используется для математической записи задачи в виде нелинейных уравнений. Для решения системы нелинейных уравнений применяется метод Ньютона – Рафсона, на каждой итерации которого используется метод Гаусса для нахождения экстремума по каждой переменной.

Представим термодинамическую систему в виде смеси индивидуальных веществ, взаимодействующих между собой, и в результате этого взаимодействия система приходит в конечное равновесное состояние. Ограничения на количество вещества по каждому компоненту системы представлены уравнениями (5):

$$\begin{cases} n_{in,1} = \sum_{u=1}^U m_{u,1} \cdot n_{u,1} \\ \dots \\ n_{in,R} = \sum_{u=1}^U m_{u,R} \cdot n_{u,R} \end{cases} \quad (5)$$

где  $n_{in,1}$  – исходное количество 1-го вещества в термодинамической системе, моль;  $R$  – количество исходных веществ,  $U$  – количество возможных веществ в равновесном состоянии системы;  $m_{u,r}$  – максимально возможное количество вещества в системе;  $n_{u,r}$  – количество  $u$ -го вещества в конечном равновесном состоянии, моль.

После включения ограничений (5) в целевую функцию в виде функции Лагранжа, получаем следующее уравнение для приведенной энергии Гиббса:

$$F = \sum_{k=1}^K F_k^0 n_k - \sum_{k=1}^K n_k \cdot \ln \left( \sum_{k=1}^K n_k \right) + \sum_{k=1}^K (n_k \cdot \ln(n_k)) + \sum_{q=1}^Q F_q^0 n_q + \sum_{r=1}^R l_r \cdot \left( \sum_{u=1}^U m_{u,r} \cdot n_{u,r} - n_{in,r} \right) \quad (6)$$

Продифференцировав целевую функцию (6) по количеству веществ (от  $q$  до  $Q$  для твердых веществ) и (от  $k$  до  $K$  для газов), а также по неопределенным множителям Лагранжа  $l$  (от  $r$  до  $R$ ), получаем систему нелинейных уравнений.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F}{\partial n_q} = F_q + \sum_{r=1}^R m_{q,r} \cdot l_r = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial n_Q} = F_Q + \sum_{r=1}^R m_{Q,r} \cdot l_r = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial n_k} = F_k + \sum_{r=1}^R m_{k,r} \cdot l_r - \ln(n_k) + \ln\left(\sum_{k=1}^K n_k\right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial n_K} = F_K + \sum_{r=1}^R m_{K,r} \cdot l_r - \ln(n_K) + \ln\left(\sum_{k=1}^K n_k\right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial l_r} = \sum_{u=1}^U m_{u,r} \cdot n_{u,r} - n_{in,r} = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial l_R} = \sum_{u=1}^U m_{u,R} \cdot n_{u,R} - n_{in,R} = 0. \end{array} \right. \quad (7)$$

**Обсуждение результатов.** Для решения системы нелинейных уравнений (7) использовали метод Ньютона – Рафсона.

Проблема сходимости метода Ньютона – Рафсона решена благодаря введению новых неизвестных и замене  $n_i = z_i^2$  в уравнении (6).

Систему уравнений (5) с учетом замены можно представить в следующем виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F}{\partial z_q} = 2 \cdot z_q \cdot \left( F_q + \sum_{r=1}^R m_{q,r} \cdot l_r \right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial z_Q} = 2 \cdot z_Q \cdot \left( F_Q + \sum_{r=1}^R m_{Q,r} \cdot l_r \right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial z_k} = 2 \cdot z_k \cdot \left( F_k + \sum_{r=1}^R m_{k,r} \cdot l_r - 2 \cdot \ln(z_k) + \ln\left(\sum_{k=1}^K z_k^2\right) \right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial z_K} = 2 \cdot z_K \cdot \left( F_K + \sum_{r=1}^R m_{K,r} \cdot l_r - 2 \cdot \ln(z_K) + \ln\left(\sum_{k=1}^K z_k^2\right) \right) = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial l_r} = \sum_{u=1}^U m_{u,r} \cdot n_{u,r}^2 - n_{in,r} = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F}{\partial l_R} = \sum_{u=1}^U m_{u,R} \cdot n_{u,R}^2 - n_{in,R} = 0. \end{array} \right. \quad (8)$$

Значения производных в системе уравнений (8) обозначим, как вектор  $F(\bar{z}, \bar{l})$ .

В общем виде метод Ньютона для системы нелинейных уравнений представлен уравнением:

$$F(\bar{z}, \bar{l}) \approx F(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)}) + H(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)}) \cdot g(\Delta\bar{z}, \Delta\bar{l})$$

где  $F(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)})$  – вектор начальных значений,  $H(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)})$  – Гессиан,  $g(\Delta\bar{z}, \Delta\bar{l})$  – вектор приращения значений.

Матрица Гессе (Гессиан) функции  $F$  имеет вид:

$$H(\bar{z}, \bar{l}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial z_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_1 \partial z_{K+Q}} & \frac{\partial^2 F}{\partial z_1 \partial z_{K+Q+r}} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_1 \partial z_{K+Q+R}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q} \partial z_1} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q}^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q} \partial z_{K+Q+r}} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q} \partial z_{K+Q+R}} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+r} \partial z_1} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+r} \partial z_{K+Q}} & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+r}^2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+r} \partial z_{K+Q+R}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+R} \partial z_1} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+R} \partial z_{K+Q}} & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+R} \partial z_{K+Q+r}} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial z_{K+Q+R}^2} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Определив производные, можно выделить области с однотипными значениями и значениями равными нулю.

$$H(\bar{z}, \bar{l}) = \begin{pmatrix} D_1 & \dots & G_{1,K+Q} & V_{1,K+Q+r} & \dots & V_{1,K+Q+R} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ G_{K+Q,1} & \dots & D_{K+Q} & V_{K+Q,K+Q+r} & \dots & V_{K+Q,K+Q+R} \\ V_{K+Q+r,1} & \dots & V_{K+Q+r,K+Q} & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ V_{K+Q+R,1} & \dots & V_{K+Q+R,K+Q} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Элементы главной диагонали  $D_i$  вычисляются с помощью следующего соотношения:

$$D_j = \begin{cases} 2 \cdot \left( F_j + \sum_{q=1}^Q m_{j,r} \cdot l_r \right), & \text{если фаза конденсированная} \\ 2 \cdot \left( F_j + \sum_{k=1}^K m_{j,k} \cdot l_k + 2 \cdot \ln(z_j) - \ln \left( \sum_{k=1}^K z_k^2 \right) + 2 - \frac{2 \cdot z_j}{\sum_{k=1}^K z_k^2} \right), & \text{если фаза газообразная} \end{cases} \quad (11)$$

При этом индекс  $k$  в  $z_k$  соответствует газообразным веществам.

Вторые производные по ограничениям имеют общую формулу:

$$V_{ij} = \begin{cases} V_{K+Q+r,u} = m_{ru} \cdot (2 \cdot z_r), & \text{если номер строки} > \text{номера столбца} \\ V_{u,K+Q+r} = m_{ur} \cdot (2 \cdot z_r), & \text{если номер строки} < \text{номера столбца} \end{cases} \quad (12)$$

При этом  $V_{ij} = V_{ji}$ , где  $i = 1+U, \dots, R+U$ ;  $j = 1, \dots, U$ , где  $R$  – количество реагентов,  $U$  – количество продуктов реакций.

Для газовых веществ получается общая формула:

$$G_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если фаза конденсированная} \\ -4 \cdot z_i \cdot z_j, & \text{если фаза газообразная} \\ \sum_{j=1}^K z_j^2 \end{cases} \quad (13)$$

где  $i$  – номер столбца, а  $j$  – номер строки.

Следующим этапом является нахождение изменения по искомым переменным с помо-

щью метода Гаусса. Каждый элемент матрицы (10) по столбцам умножается на изменение по координате (вектор приращений):

$$H(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)}) \cdot g(\Delta\bar{z}^{(1)}, \Delta\bar{l}^{(1)}) = -F(\bar{z}^{(0)}, \bar{l}^{(0)}) \quad (14)$$

$$\text{где } \Delta\bar{z} = \bar{z}^{(i+1)} - \bar{z}^{(i)}, \Delta\bar{l} = \bar{l}^{(i+1)} - \bar{l}^{(i)}$$

Методом Гаусса (система из уравнений становится линейной) определяются такие изменения  $\Delta\bar{z}$  и  $\Delta\bar{l}$ , при которых значение невязки по каждой строке из формулы (8) и сумма по строке из матриц (10) равнялись бы нулю.

Значение  $\bar{z}^{(i+1)}$  на новом шаге для химических элементов вычисляются по формуле.

$$\bar{z}^{(i+1)} = \bar{z}^{(i)} + \Delta\bar{z}^{(i)} \cdot w^{(i)} \quad (15)$$

где  $i$  – номер итерации,  $w^{(i)}$  – коэффициент, учитывающий ограничения по значению переменной, таким образом что  $z^{(i+1)}$  не могла бы быть меньше или равна нулю и не могла быть больше максимального значения  $z_{\max}^{(i)}$ .

Если новое значение больше нуля и меньше максимально допустимого, то

$$0 < z^{(i+1)} \leq z_{\max}^{(i)}, \text{ то } w^{(i)} = 0,1.$$

Если новое значение меньше нуля, то  $z^{(i+1)} \leq 0$ , то  $w^{(i)} = -z^{(i)} / \Delta z^{(i)} \cdot 0,97$ .

Если новое значение больше максимально допустимого:  $z^{(i+1)} > z_{\max}^{(i)}$ , то  $w^{(i)} = (z_{\max}^{(i)} - z^{(i)}) / \Delta z^{(i)} \cdot 0,97$ .

Таким образом, реализуется одна итерация. На следующей итерации рассчитывается матрица Гессе (10), с учетом полученных значений  $z^{(1)}$  и  $l^{(1)}$ , а с помощью метода Гаусса находят новые значения  $z^{(2)}$  и  $l^{(2)}$ . Итерационный процесс завершается, когда изменения по всем переменным окажутся меньше требуемой точности (как показано на рис. 1).



**Рис.1. Алгоритм применения численных методов в математической модели нахождения равновесного состава термодинамической системы**

**Fig.1. An algorithm for applying numerical methods in a mathematical model for finding the equilibrium composition of a thermodynamic system**

В случае, когда метод Ньютона – Рафсона расходится, то есть получают бесконечно большие или бесконечно малые значения, применяется Симплекс метод.

**Вывод.** Разработанный алгоритм был протестирован для 50-ти исходных наборов из

двух и трех исходных веществ при трех различных температурах и значения, получаемые в разработанной программе и в программе Terra [7, 9], совпадают.

Данный метод используется в программе T-Energy и позволяет рассчитать равновесное состояние сложных многокомпонентных гетерогенных систем.

#### Библиографический список:

1. Барбин Н.М., Сидаш И.А., Терентьев Д.И., Алексеев С.Г. Компьютерное моделирование термических процессов с участием радионуклидов U, Cl, Pu, Be, Ni, Am при нагревании радиоактивного графита в атмосфере углекислого газа // Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. – 2019. – № 2. – С. 185–197. <https://doi.org/10.26583/npe.2019.2.16>
2. Павлюк А.О., Загуменнов В.С., Котляревский С.Г., Беспала Е.В. Термодинамическое моделирование равновесного состава продуктов реакции при обезвреживании технологического канала уран-графитового реактора // Теплоэнергетика. – 2018. – № 1. – С. 61–67. DOI: 10.1134/S0040363618010058
3. Куликова Т.В., Майорова А.В., Быков В.А., Шуняев К.Ю. Равновесный состав и термодинамические свойства ассоциированных расплавов системы Cu-In // Расплавы. – 2013. – № 5. – С. 51–58.
4. Пешкичев И.В., Макеева И.Р., Шульц О.В., Пугачев В.Ю., Дубосарский В.Г., Паукова А.Е., Кузнецова О.В., Дарина Л.Н., Бочкарева А.А. Программный комплекс TeDy для решения задач термодинамического моделирования // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2018. – Т. 11. – № 1. – С. 84–94. DOI: 10.14529/mmp180108
5. Юманова И.Ф., Воеводина О.А. Определение химически равновесного состава продуктов сгорания органического топлива. // Вестник ИжГТУ имени М.Т. Калашникова. – 2013. – № 2 (58). – С. 154–156.
6. Купцов В.И., Шихман Ю.М., Шлякотин В.Е. Универсальный программный комплекс процедур равновесного расчета состава и параметров многокомпонентных гомогенных и гетерогенных смесей // Авиационные двигатели. – 2019. – № 4 (5). – С. 31–36.
7. Белов Г.В., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013. – 96 с.
8. Синярев Г.В., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов – М.: Академический научно-издательский, производственно-полиграфический и книгораспространительский центр РАН "Издательство "Наука", 1982. – 260 с.
9. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. – М.: Научный Мир, 2002. – 184 с.
10. 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.
11. Сеченов П.А., Рыбенко И.А. База данных и программа для определения термодинамических свойств индивидуальных веществ // Информатика и системы управления. – 2022. – № 1 (71). – С. 17–26. DOI: 10.22250/18142400\_2022\_71\_1\_17
12. Сеченов П.А., Рыбенко И.А. Программа расчета термодинамических свойств химических реакций // Южно-Сибирский научный вестник. – 2022. – № 1 (41). – С. 60–64. DOI 10.25699/SSSB.2022.41.1.009
13. Игнатович В. Н. Парадокс Гиббса с точки зрения математика: Монография. – Киев: АТОПОЛ, 2010. – 80 с.
14. Макаркин В.М., Апайчева Л.А. Метод Лагранжа решения экстремальной задачи // Международный студенческий научный вестник. – 2016. – № 3-3. – С. 337–338.
15. Исмаилов Р.Т. Повышение эффективности использования резервов активной части основных производственных фондов в строительстве // Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. – 2017. – Т. 44. – № 1. – С. 186-195. <https://doi.org/10.21822/2073-6185-2017-44-1-186-195>
16. Шабалин Г.С., Паздерин А.В., Чусовитин П.В., Банных П.Ю., Тащилин В.А. Анализ статической устойчивости с использованием квадратичной целевой функции и обобщенного метода Ньютона // Материалы международной научно-технической конференции. – Иваново: ИГЭУ. – 2015. – С. 249–254.
17. Журтов А.В., Хежев Т.А., Хаджишалапов Г.Н., Карданов А.А., Шогенцуков М.А. Напряженно-деформированное состояние двухслойных армоцементных оболочек в условиях пожара // Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. – 2022. – Т. 49. – № 1. – С. 112-121. <https://doi.org/10.21822/2073-6185-2022-49-1-112-121>
18. Соколова М.А. Система линейных уравнений, основные понятия. Метод Гаусса // Аллея науки. – 2018. – Т. 6. – № 6 (22). – С. 297–301.

#### References:

1. Barbin N.M., Sidash I.A., Terent'ev D.I., Alekseev S.G. Computer-simulated thermodynamic behavior of radionuclides U, Cl, Pu, Be, Ni, Am when radioactive graphite is heated in a carbon dioxide atmosphere. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2019; 2:185–197. (In Russ). <https://doi.org/10.26583/npe.2019.2.16>
2. Pavljuk A.O., Zagumenov V.S., Kotljarevskij S.G., Bepala E.V. Thermodynamic simulation of equilibrium composition of reaction products at dehydration of a technological channel in a uranium-graphite reactor. *Thermal Engineering*. 2018; 1: 61–67. (In Russ). DOI: 10.1134/S0040363618010058
3. Kulikova T.V., Majorova A.V., Bykov V.A., Shunjaev K.Ju. Equilibrium composition and thermodynamic properties of associated melts of the system Cu-In. *Melts*. 2013; 5:51–58. (In Russ).
4. Peshkichev I.V., Makeeva I.R., Shul'c O.V., Pugachev V.Ju., Dubosarskij V.G., Paukova A.E., Kuznecova O.V., Darina L.N., Bochkareva A.A. Software TeDy for thermodynamical modelling. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software* (Bulletin SUSU MMCS), 2018; 11(1): 84-94. (In Russ). DOI: 10.14529/mmp180108
5. Jumanova I.F., Voevodina O.A. Definition of chemical equilibrium composition of fossil fuel combustion products. *Bulletin of*



- IzhSTU named after M.T. Kalashnikov*. 2013; 2 (58): 154 –156. (In Russ).
6. Kupcov V.I., Shihman Ju.M., Shljakotin V.E. The universal procedures code for equilibrium calculation of the composition and parameters of the multi-component homogeneous and heterogeneous mixtures. *Aircraft engines*. 2019; 4 (5):. 31 – 36. (In Russ).
  7. Belov G.V., Trusov B.G. Thermodynamic modeling of chemically reacting systems. Moscow: Bauman MSTU Publ., 2013; 96. (In Russ).
  8. Sinjarev G.V., Vatolin N.A., Trusov B.G., Moiseev G.K. Computer application for thermodynamic calculations of metallurgical processes. Moscow: Academic Scientific Publishing, Production, Printing and Book Distribution Center of the Russian Academy of Sciences "Nauka Publishing House", 1982; 260. (In Russ).
  9. Belov G.V. Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs. Moscow: Scientific World, 2002: 184. (In Russ).
  10. 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; 3 (41): 18 – 27. (In Russ.).
  11. Sechenov P.A., Rybenko I.A. Database and program for determining thermodynamic properties of individual substances. *Informatika i sistemy upravleniya*. 2022; 1(71): 17-26. (In Russ.). DOI: 10.22250/18142400\_2022\_71\_1\_17
  12. Sechenov P.A., Rybenko I.A. Program for calculating the thermodynamic properties of chemical reactions. *South-Siberian Scientific Bulletin*. 2022; 1 (41):60 – 64. (In Russ.). DOI 10.25699/SSSB.2022.41.1.009
  13. Ignatovich V. N. Gibbs' paradox from the point of view of a mathematician: Monograph. Kiev: ATOPOL, 2010; 80 .
  14. Makarkin V.M., Apajcheva L.A. Lagrange method for solving an extreme problem. *International Student Scientific Bulletin*. 2016; 3(3): 337 – 338. (In Russ).
  15. Ismailov R.T. Improving reserve use efficiency of the active portion of main production funds in construction. *Herald of Daghestan State Technical University. Technical Sciences*. 2017;44(1):186-195. (In Russ.) <https://doi.org/10.21822/2073-6185-2017-44-1-186-195>
  16. Shabalin G.S., Pazderin A.V., Chusovitin P.V., Bannyh P.Ju., Tashhilin V.A. Static stability analysis using quadratic objective function and generalized Newton's method. Materials of the international scientific and technical conference. Ivanovo: IGEU, 2015; 249 – 254. (In Russ).
  17. Zhurtov A.V., Khezhev T.A., Khadzhishalapov G.N., Kardanov A.A., Shogentsukov M.A. Stress strain state of double-layered ferrocement shells under the fire condition. *Herald of Daghestan State Technical University. Technical Sciences*. 2022;49(1):112-121. (In Russ.) <https://doi.org/10.21822/2073-6185-2022-49-1-112-121>
  18. Sokolova M.A. System of linear equations, basic concepts. The Gauss method. *Alley of Science*. 2018; 6(22): 297 –301. (In Russ).

**Сведения об авторах:**

Сеченов Павел Александрович, кандидат технических наук, доцент кафедры прикладных информационных технологий и программирования; [pavesa89@mail.ru](mailto:pavesa89@mail.ru); ORCID.0000-0003-4551-3822

Рыбенко Инна Анатольевна, доктор технических наук, доцент, профессор, заведующая кафедрой прикладных информационных технологий и программирования; [gybenkoi@mail.ru](mailto:gybenkoi@mail.ru); ORCID.0000-0003-1679-0839

**Information about the authors:**

Pavel A. Sechenov, Cand.Sci. (Eng.), Assoc. Prof., Department of Applied Information Technologies and Programming; [pavesa89@mail.ru](mailto:pavesa89@mail.ru); ORCID.0000-0003-4551-3822

Inna A. Rybenko, Dr. Sci., (Eng.), Assoc. Prof., Prof., Head of the Department of Applied Information Technologies and Programming; [pavesa89@mail.ru](mailto:pavesa89@mail.ru); ORCID.0000-0003-4551-3822

**Конфликт интересов/Conflict of interest.**

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов/The authors declare no conflict of interest.

**Поступила в редакцию/ Received** 15.10.2022.

**Одобрена после рецензирования / Revided** 02.11.2022.

**Принята в печать /Accepted for publication** 02.11.2022.