

> SIMULIS THERMODYNAMICS. ЧТО НОВОГО?

На страницах журнала CADmaster мы уже рассказывали [1-2] о набирающем популярность среди российских проектировщиков сервере расчетов термодинамических свойств и фазовых равновесий Simulis Thermodynamics. Появление на отечественном рынке этого программного пакета — явление далеко не случайное, ведь в среде технологического проектирования редко встретишь расчетный инструмент со столь широкой областью применения (его можно рекомендовать для использования в химической, нефтехимической, нефтегазовой промышленности, энергетике и многих других отраслях). Тем самым Simulis позволяет "объять необъятное" и избавить-

ся от тех "пробелов", которые могут остаться при использовании аналогичных программных средств для расчетов физических свойств и фазовых равновесий. Более того, Simulis Thermodynamics позиционируется как инструмент, с которым могут работать не только специалисты по термодинамике, но и рядовые проектировщики-технологи, что является приятной неожиданностью для программы с такой сложной предметной областью. Ну а с локализацией Simulis Thermodynamics для русскоязычных пользователей, проведенной НТП Трубопровод в 2012-2013 гг., удобство использования данного инструмента выросло в разы. В этой статье речь пойдет о нововведениях и улучшениях, появив-

шихся в программе за время, прошедшее с момента последней публикации.

На смену версии 1.4.8.0 Simulis Thermodynamics, речь о которой шла ранее [2], в феврале нынешнего года компанией ProSim SA была выпущена существенно обновленная программа — версия 2.0, предлагающая пользователю ряд значительных усовершенствований в области как расчетного функционала, так и пользовательского интерфейса. Но прежде всего следует отметить, что это первая версия Simulis, с которой начали поставляться русскоязычные материалы по ее использованию, в том числе — и подробное руководство (рис. 1) по термодинамическим моделям, использующимся при расчетах.

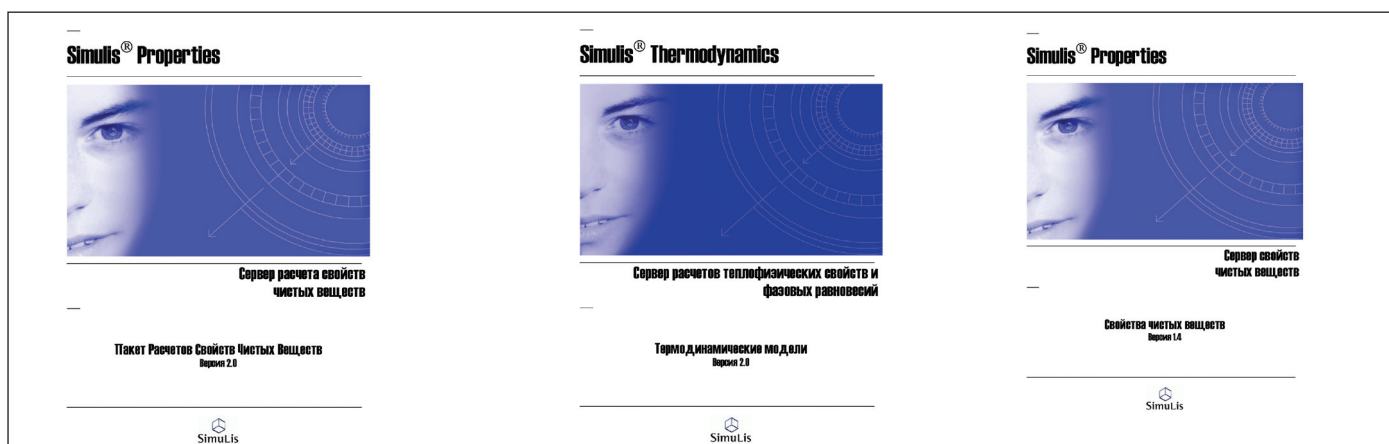


Рис. 1

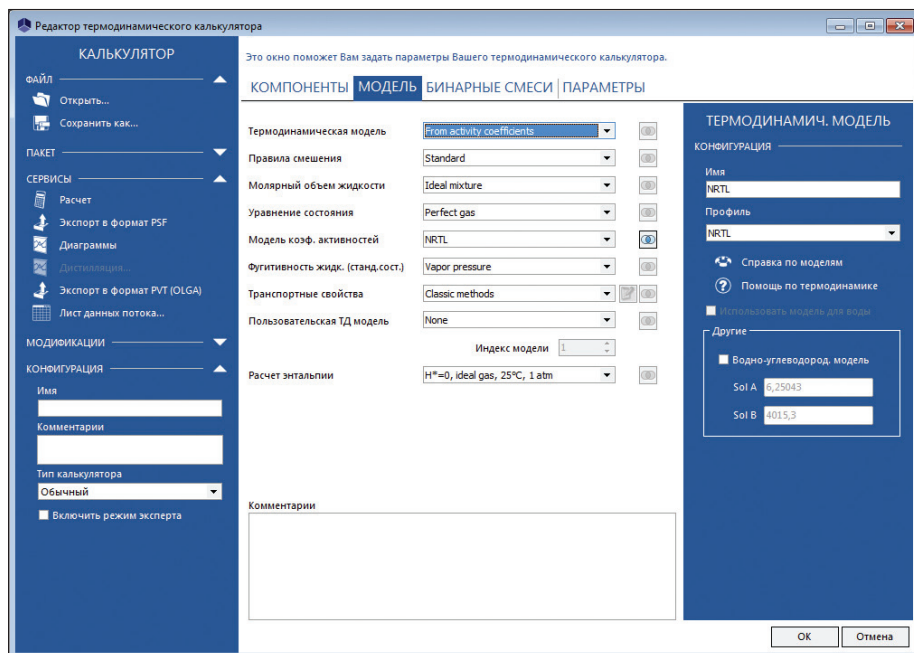


Рис. 2

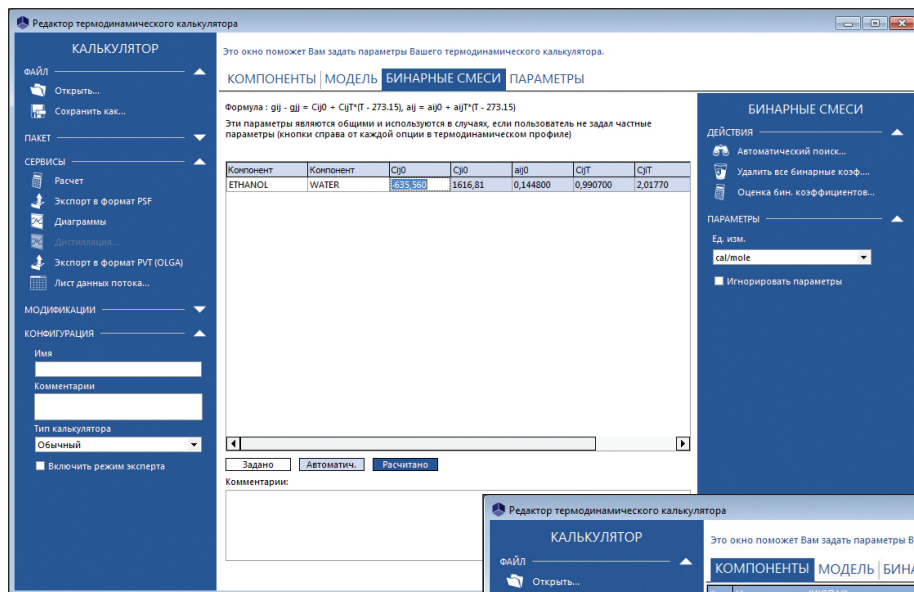


Рис. 3

Это руководство (точнее сказать, книга) имеет самостоятельную ценность даже без привязки к самой программе Simulis Thermodynamics, поскольку в нем описываются классические модели и методы расчетов теплофизических свойств и фазовых равновесий, а также новейшие, современные и актуальные исследования в данной области. И если упоминания первых можно встретить (хоть и нечасто) в специализированных справочниках и книгах на русском языке, то описания вторых в русскоязычной литературе в настоящий момент просто нет, что делает указанное руководство незаменимым справочным пособием. Кроме

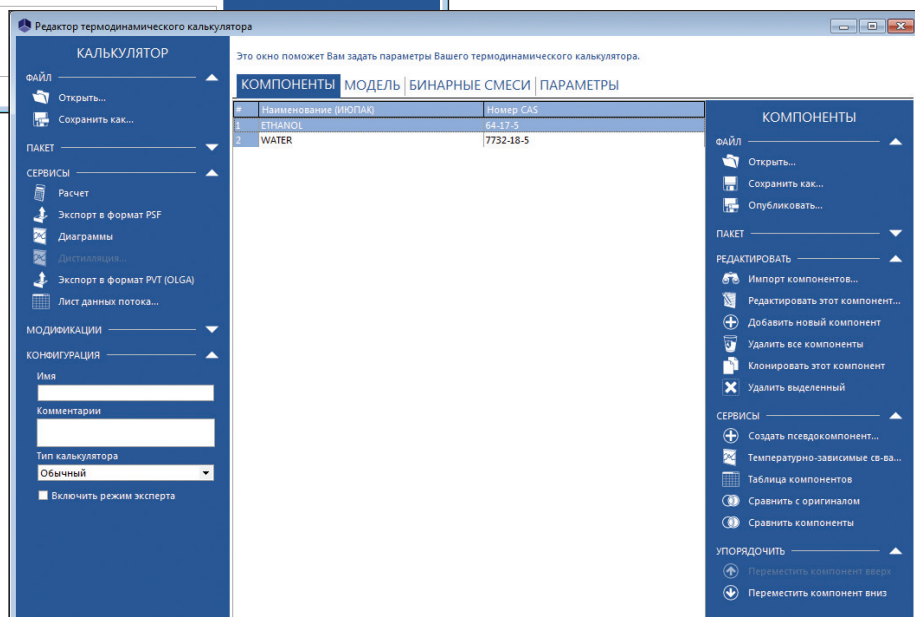


Рис. 4

того, любой пользователь теперь вместе с программой получает ряд примеров ее использования (с описанием пошаговой работы) на русском языке, описание методов расчетов свойств чистых веществ и другие русскоязычные материалы.

Первое, что бросается в глаза при запуске новой версии Simulis Thermodynamics — это новый графический пользовательский интерфейс (рис. 2).

Его внешний вид значительно изменился, стал более современным, более выразительным, но при этом сохранил все привычные для пользователя возможности.

При работе над новым интерфейсом разработчики постарались сделать его привычным для пользователя. И действительно, при работе с программой курсор машинально по привычке тянется к нужной кнопке или пункту меню (рис. 3-4).

Изменения в программе коснулись не только внешнего вида, но и расчетных возможностей. Так, в Simulis Thermodynamics теперь появился специальный сервис оценки значений основных опорных констант (критических давления и температуры, фактора ацентricности, нормальных температур кипения и плавления и т.д.) чистых веществ (рис. 5).

Этот сервис будет полезен в тех случаях, когда необходимо для расчетов свойство какого-либо вещества нам неизвестно. Поскольку экспериментальное определение большинства опорных констант химических веществ затруднительно (а в отдельных случаях и вовсе невозможно), их можно также рассчитывать по специальным эмпирическим

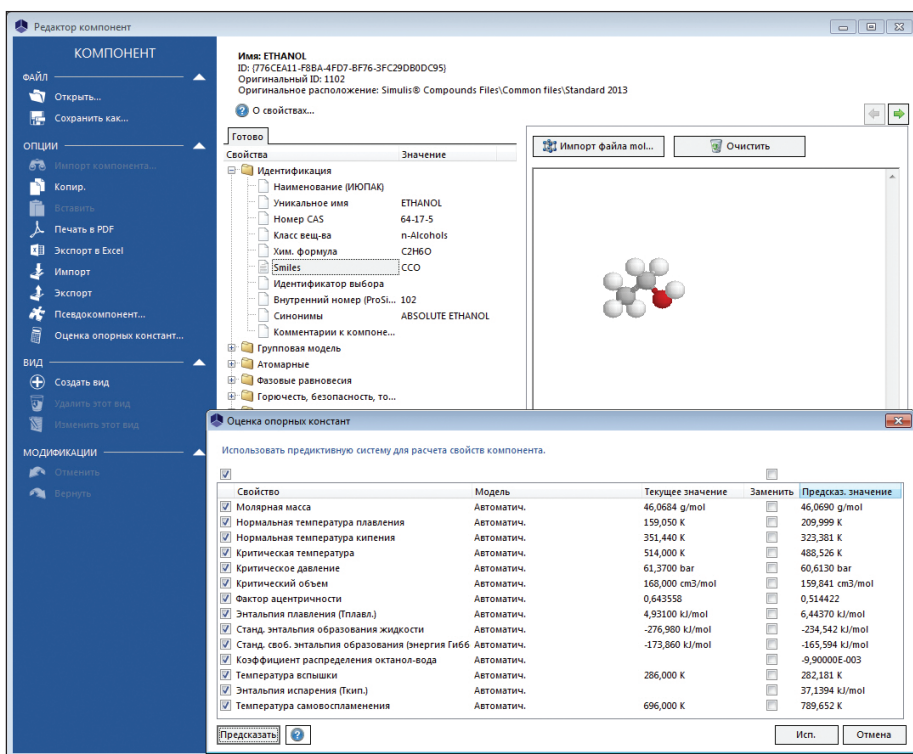


Рис. 5

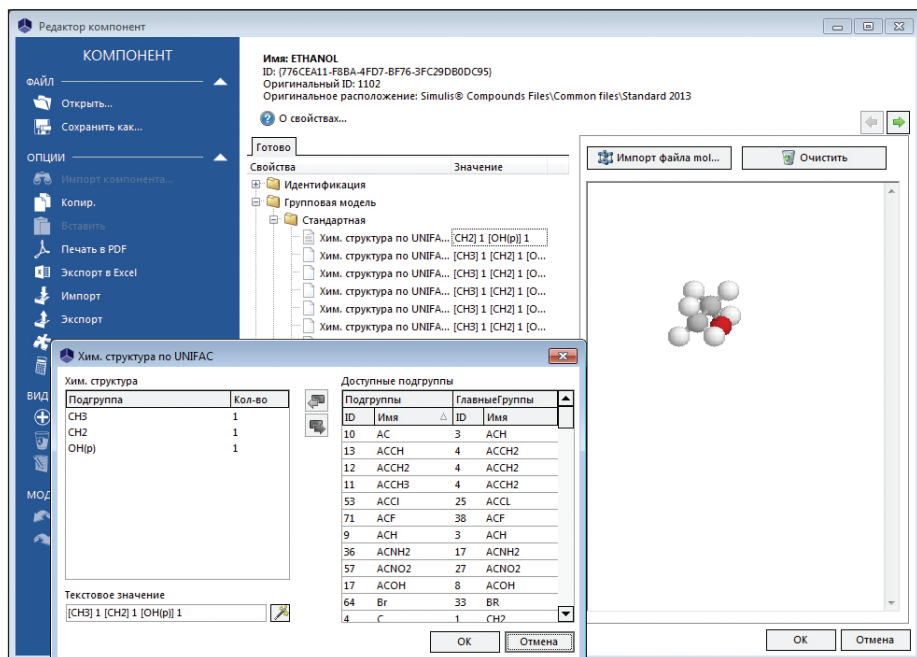


Рис. 6

корреляциям, и теперь Simulis способен выполнять такие расчеты автоматически (для каждого из определяемых свойств в программе заложен целый ряд различных расчетных корреляций). Среди новых расчетных возможностей программы следует отметить функцию автоматической генерации структуры молекулы вещества (по модели UNIFAC

(рис. 6)) по ее упрощенному линейному представлению — так называемому "smiles". Здесь важно пояснить, что довольно часто на практике (особенно в последнее время) при расчете свойств и фазовых равновесий смесей химических веществ их взаимодействие друг с другом учитывают по тому, какие функциональные группы входят в состав

молекул взаимодействующих соединений. В прежних версиях Simulis пользователь при вводе нового вещества в базу данных программы мог указать его структуру (набор функциональных групп) для расчета взаимодействия этого вещества в смеси с другими. Теперь же программа может определить структуру вещества автоматически по известной структуре "smiles". "Smiles" расшифровывается как Simplified Molecular-Input Line-Entry System — упрощенная система линейного представления молекул (например, структура пропана в этой системе — CCC, этанола — CCO, толуола — Cc1ccccc1 и т.д.). Эту структуру на практике можно легко получить для любого вещества, к примеру, в Интернете (в сети существует множество открытых баз данных по химическим соединениям — вроде *chemweb.com* или *chemspider.com*, в большинстве из которых приводятся "smiles"-структуры веществ) или в специальных справочных пособиях.

Эти новые дополнительные возможности программы значительно экономят время, которое пользователь тратит на работу с программой (в том числе на ввод данных и ведение баз данных компонентов). Такая экономия времени достигается и благодаря тому факту, что в новейшей версии Simulis оптимизирована работа на различных компьютерах с различными операционными системами. Теперь Simulis Thermodynamics не только поддерживает все современные настольные операционные системы (в том числе Windows 8), но и существует в двух модификациях (32- и 64-разрядной), каждая из которых предназначена для работы на машинах с соответствующей архитектурой.

Ну и, разумеется, расчетный функционал — самое "сердце" программы — тоже претерпел ряд изменений. Дело в том, что разработчики, идя в ногу со временем, с каждой новой версией добавляли в программу новые расчетные модели и обновляли базы данных параметров бинарных взаимодействий на основе новейших исследований. Так, в рассматриваемой версии были реализованы новые температурно-зависимые параметры бинарных взаимодействий для различных пар компонентов по групповым моделям NRTL и UNIQUAC, а также предусмотрена возможность расчетов термодинамических свойств и фазовых равновесий смесей веществ по следующим новым моделям:

■ кубическое уравнение состояния SRK-Twu (на основе уравнения

Статистическая теория возмущений в полярных цепочках (Chapman *et al.* 1990)

$$\frac{A - A^\circ}{NkT} = m(a^{hs} + a^{disp}) + a^{assoc} + a^{chain} + a^{polar}$$

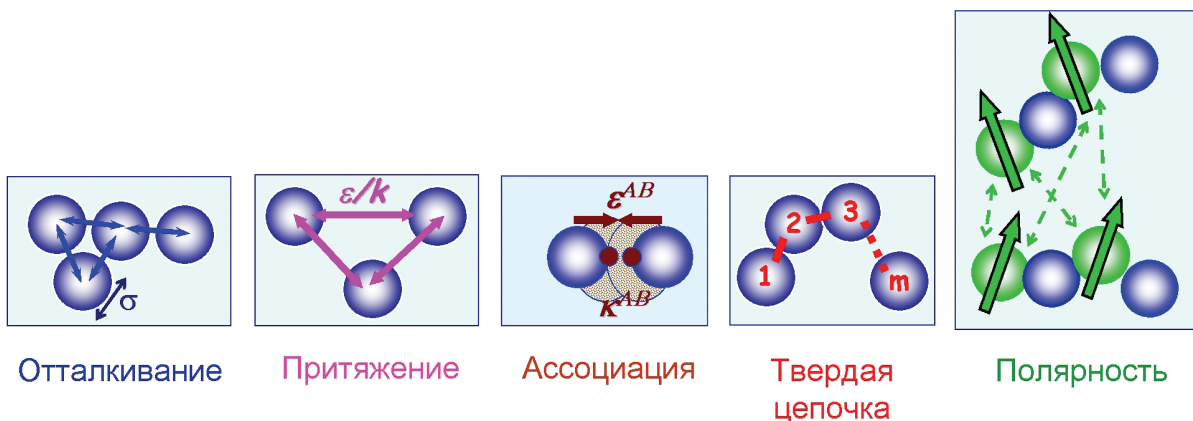


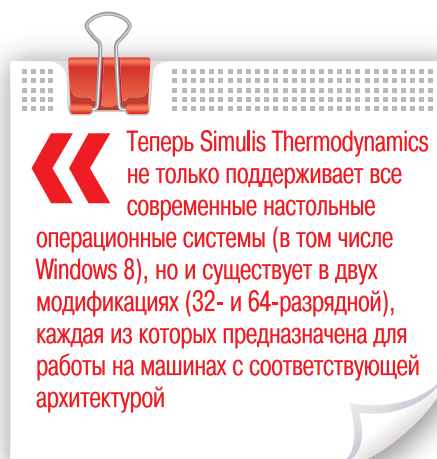
Рис. 7

Соава-Редлиха-Квонга с "альфа-функцией" и правилами смещения для полярных и неполярных компонентов на основе исследований Twu);

- кубическое уравнение состояния со смещением объема (VTPR – Volume-translated Peng-Robinson), в том числе и в предикативной форме, позволяющее достаточно точно описывать зависимость удельного объема от давления и температуры как для газовой, так и для жидкой фазы. Это обеспечит возможность объединить использование метода групповых вкладов модели UNIFAC с преимуществами единого уравнения состояния для расчета в широком диапазоне давлений и температур;
- метод групповых вкладов для модели PPC-SAFT (GC-PPC-SAFT (рис. 7)), разработанный в сотрудничестве с институтом IFPEN, позволяет эффективно решать задачи расчетов равновесия систем пар-жидкость и жидкость-жидкость (для несмешивающихся жидкостей) для углеводов и кислородсодержащих веществ (спиртов, кислот, эфиров, кетонов). Такие продукты характерны как для процессов нефтехимии, так и для пищевой промышленности и производства биотоплива, поэтому важность этой новой возможности программы трудно переоценить;
- уравнение состояния Сорейде-Уитсона, учитывающее взаимную

растворимость морской воды и углеводородов, которое основано на модификации уравнения состояния PR. Оно позволяет корректно учесть растворимость углеводородов в морской

пользователь получает доступ к самым актуальным и современным исследованиям в области термодинамики, а также к рекомендациям по их использованию и расчетам.



Работа над программой постоянно продолжается, и в ближайшее время в Simulis Thermodynamics ожидается появление еще ряда существенных усовершенствований. Так, к примеру, в будущей версии разработчики планируют добавить удобную разбивку термодинамических моделей на отдельные категории (с ростом количества доступных моделей потребность в данной функции становится все сильнее), а также усовершенствовать расчетные возможности программы. Но, как говорится, всего не расскажешь – лучше один раз попробовать. Пробные версии программы всегда к вашим услугам!

Литература

1. Корельштейн Л.Б., Лисин С.Ю. Simulis Thermodynamics. Инструмент технолога, который всегда под рукой // CADmaster/2011/№ 3. – С. 94-101.
2. Лисин С.Ю., Корельштейн Л.Б. "Русский" Simulis и другие новости термодинамики // CADmaster/2013/№ 3. – С. 86-95.

Сергей Лисин,
Леонид Корельштейн
ООО "НТП Трубопровод"
E-mail: it@truboprovod.ru

воде, и наоборот – соленой воды в жидких углеводородах, в том числе при высоких давлениях и температурах. Это даст возможность выполнять расчеты ТФС и ФР при моделировании процессов добычи в нефтегазовых месторождениях, включая подводные;

- модель ассоциации для фтороводорода (на основе последних исследований Ли-Кима и Виско-Кофке).
- Таким образом, имея под рукой новейшую версию Simulis Thermodynamics,