

УДК 550.42+550.89+551.21+552.3+552.112+553.212+546.212+549.691

НЕКОММЕРЧЕСКОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ БАЗЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ГЕОХИМИИ И ТЕРМОДИНАМИКИ

Н.В.Суздальницкая, А.В.Евстигнеев

Институт геохимии и аналитической химии РАН им. В.И. Вернадского, г. Москва

Вестник ОГТТГН РАН № 2(12)2000, т. 2

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/2-2000/empg_99/mineral_11.htm#begin

© 2000 ОИФЗ РАН, ОГТТГН РАН

Современная геохимия тесно связана с вычислительными методами реализованными в программном обеспечении. Обилие предложений некоммерческих (общественные интернет - библиотеки) и коммерческих, позволяет найти решение для большого числа задач, ранее считавшихся трудоемкими и долговременными. Проблемы заключаются в отсутствии четких решений для класса сложных термодинамических расчетов, что связано собственно с их сложностью, правильностью постановки и др. Проблема также в том, что какая-то одна программа не позволяет охватить свесь спектр термодинамических алгоритмов.

Пристальное изучение данного вопроса позволило нам обнаружить весьма значительное число некоммерческих программ в интернете – доменов и программного обеспечения общего пользования. При всех имеющихся недостатках эта форма решения указанного класса практических задач имеет преимущества перед другими. В большинстве современных продуктов это достигается путем адаптации исходной программ своим потребностям с помощью встроенных интерактивных функций. Наш опыт в этом направлении подтверждает существующее мнение о том, что использование такого подхода в ряде случаев превосходит по результатам другие пути решения. Для работы с такими программами, обычно необходимо начать работу с определения исходных условий. После этого необходимо предположить функциональную форму расчетов и зафиксировать некоторые неизвестные эмпирические параметры. После подготовки термодинамической модели становится возможным вычисление равновесных свойств системы. Это достигается наличием в программах алгоритмов термодинамики. В случае, когда эмпирические параметры неизвестны сначала необходимо оценить неизвестные параметры с помощью тех же программ.

Настоящей работа посвящена обзору термодинамической и геохимической информации, представленной в Интернете, в основном используя зарубежные WWW-страницы. Ссылки и краткая информация об этих базах данных и программном обеспечении представлены ниже.

Членами научной группы "Дианик" университета "Дубна" под руководством И.Л. Ходаковского проводится разработка программных продуктов комплекса "DiaNIK" под Windows-95, создание новых алгоритмов обработки термодинамической информации и их реализация в виде программ, объединение отдельных программ в самостоятельные блоки и дальнейшее их тестирование. Собранная библиографическая информация, сопровождающаяся краткими сведениями по условиям проведения экспериментов, систематизирована на основе стандартной термохимической последовательности и числе химических элементов в системе

1.	REACTION-Web -	REACTION-Web - F*A*C*T online H, S, G, V, Cp properties calculation for a species or chemical reaction; CRCT , Ecole Polytechnique, Montreal, Quebec, Canada.	REACTION - WEB - F*A*C*T расчеты термодинамических констант H, S, G, V, Cp для соединений или химических реакций; CRCT, Ecole Polytechnique, Монреаль, Квебек, Канада.	http://www.crct.polymtl.ca/fact/web/reacweb.htm
2.	Equilibrium point calculation	Equilibrium point calculation for a three-component system using SGTE Solution database; Thermo-Calc Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden.	Вычисление равновесий для трех-компонентных систем, использующих SGTE базу данных раствора; "Термо – Calc" Королевский Институт Технологии, Стокгольма, Швеция.	http://www.met.kth.se/~mickus/tc2.html

3.	WEBINVEQ	Geology - links to online thermodynamics and phase equilibrium calculations in geology such as WEBINVEQ for performing thermobarometry calculations; Terry Gordon, University of Calgary, Alberta, Canada.	Геология – расчеты термодинамических и фазовых равновесий в геологии такие как WEBINVEQ для выполнения термобарометрических вычислений; Тэрри Гордон, Университет Калгари, Альберта, Канада.	http://ichor.geo.ucalgary.ca/~tmg/Research/thermo_link_s.html
4.	CODATA Thermodynamic Values	CODATA Thermodynamic Values for the properties of approximately 150 key chemical substances; International Council of Scientific Unions CODATA - Committee on Data for Science and Technology	CODATA :Термодинамические значения свойств приблизительно 150 ключевых химических соединений; Международный Совет Научных Союзов CODATA - Комитет по Данным для Науки и техники	http://www.nrc.ca/programs/codata/databases/key1.html
5.	Mineral Databases	Mineral Databases - free thermodynamic data (Delta H(298K), S(298K), Cp(T), V(T) and more) searched by mineral name or constituent elements ; Thomas H. Brown, Earth & Ocean Sciences, University of British Columbia, Vancouver, Canada.	Базы данных для минералов – термодинамические данные (H (298K), S (298K), Cp (T), V (T) и др) поиск по названиям минералов или элементам; Томас Х. Браун, Кафедра Наука о Земле и Океане, Университет Британской Колумбии, Ванкувер, Канада.	http://www.science.ubc.ca/~geol323/thermo/thermo.htm
6.	NEA Data Bank	NEA Data Bank - including NEA TDB thermodynamic data bank (Delta H(298K), S(298K), Cp(T)) for various compounds of the most important elements present in high-level radioactive waste, namely U, Tc, Np, Pu, Am; Nuclear Energy Agency, France.	Банк данных NEA – включая NEA TDB термодинамический банк данных (? H (298K), S (298K), Cp (T)) для различных составов наиболее важных элементов присутствующих в высоко-активных радиоактивных отходах, (U, Tc, Np, Pu, Am); Агенство Ядерной Энергии, Франция.	http://www.nea.fr/html/dbtdb/welcome.html
7.	NIST	NIST - Standard References Data Program, including the Chemistry WebBook for free thermodynamic data (Delta H(298K), S(298K), Cp tables) for over 5000 compounds, heats of reaction data for over 3000 reactions, and ion energetics data for over 14000 compounds; Malcolm W. Chase, Gaithersburg, MD, USA.	NIST – Программа стандартных базовых данных, включая WebBook по химии для доступных термодинамических данных - ? H (298K), S (298K), Cp таблицы (более чем 5000 соединений), данные по тепловым эффектам реакций (более чем 3000), и термодинамические данные для ионов и соединений (более чем 14000); Малком В. Чейс, Gaithersburg, MD, США.	http://www.nist.gov/srd/therch.htm
8.	University Chemistry Data Tables	University Chemistry Data Tables - Delta H(298K), S(298K) and Cp(298K) of approx. 200 pure species; James A. Plambeck, University of Alberta, Canada.	Университетские Таблицы Данных по Химии - ? H (298K), S (298K) и Cp (298K) приблизительно 200 веществ; Джеймс А. Пламбек, Университет Альберты, Канада.	http://ichor.geo.ucalgary.ca/~tmg/Research/thermo_link_s.html
9.	GGWW	GGWW - includes free fortran algorithm for the equation of state of CO2, CO2-H2O mixtures; Urs Mäder, Rock-Water Interaction Group, University of Bern, Bern, Switzerland.	GGWW – включает свободный алгоритм ФОРТРАНа для уравнения состояния CO2, CO2-H2O смеси; Urs Mader, Rock-Water Interaction Group, Университет Берна, Берн, Швейцария.	http://www.ethz.ch/~ggww/
10.	Thermophysical Data	Thermophysical Data - k, Cp, density, etc. data for a wide range of materials; K & K Associates, Westminster, CO, USA	Thermophysical Данные - Cp, плотность, и т.д. данные для широкого спектра материалов; К и К Associates, Westminster, CO, США	http://www.kkassoc.com/~takinfo/protop.htm

11.	EQS4WIN	EQS4WIN - PC software package for treating a variety of thermochemical equilibrium problems in analytical chem., aquatic chem., biochemistry, CVD, combustion, environmental chem., geochemistry and metallurgy. Includes a database of over 1800 species; William R. Smith, Mathtrek Systems, Guelph, Ontario, Canada..	EQS4WIN – пакет программ для обработки ряда задач термохимических равновесий в аналитической химии, химии водной среды, биохимии, химии окружающей среды, геохимии и металлургии. Включает базу данных из более чем 1800 веществ; Уильям Р. Смит, Mathtrek Системы, Guelph, Онтарио, Канада .	http://www.mathtr ek.com/
12.	F*A*C*T	F*A*C*T - software, data and consulting services including COMPOUND pure substances; SOLUTION non-ideal solutions employing Margules polynomials, Unified Interaction Parameter Formalism, Pitzer parameters, Sublattice, Quasi-Chemical, Compound Energy etc. thermodynamic models; REACTION extensive state properties calculation; PREDOM predominance and temperature diagrams; EPH Pourbaix diagram; EQUILIB equilibrium calculations of up to 2400 species featuring ChemSage; POTCOMP, FITBIN, TERNFIG TRACER and TOOLS for treating phase diagrams; F*A*C*T databases of over 5000 compounds and 80 non-ideal solutions of ceramics, salts, mattes, slags, etc.; CRCT , Ecole Polytechnique, Montreal, Quebec, Canada.	F*A*C*T – программное обеспечение, данные и консультативные услуги, включая чистые вещества и неидеальные растворы. Различные термодинамические модели; температурные диаграммы; pH - Eh – диаграммы для 2400 соединений, F*A*C*T базы данных для более 5000 соединений и 80 не-идеальных растворов керамики, солей, шлаков, и т.д.; CRCT, Ecole Polytechnique, Монреаль, Квебек, Канада.	http://www.crct.poly mtl.ca/fact/fact.htm
13.	HSC	HSC - software and data package featuring Outokumpu HSC Chemistry for Windows. The package includes Reaction Equations, Heat Balances, Equilibrium Compositions, Formula Weights, Phase Stability Diagrams and Eh - pH - Diagrams modules which access a thermochemical database of more than 7600 compounds; Jukka Seppänen, Pori, Finland.	HSC – пакет программ и базы данных для Windows. Пакет включает реакции уравнений, тепловые балансы, состояния равновесий, молекулярный вес, диаграммы фазовой стабильности и Eh - pH – диаграммы, которые составляют термохимическую базу данных для 7600 соединений.; Jukka Seppänen, Pori, Finland.	http://www.outokumpu.fi/hsc/
14.	MALT2	MALT2 and an update – Materials-oriented Little Thermodynamic Database for Personal Computers. The software features a database (DH(298K), S(298K), Cp(T)) for 4931 species. Optional software includes gem for chemical equilibrium calculations, and CHD for constructing chemical potential diagrams; Kagaku Gijutsu-sha, Tokyo, Japan..	MALT2 и ее модификация - Небольшая Термодинамическая База данных для Персональных компьютеров. Программное обеспечение представляет базу данных (? H (298K), S (298K), Cp (T)) для 4931 соединений. Оптимальное программное обеспечение включает процедуры для вычислений химического равновесия, и CHD для построения химических потенциальных диаграмм; Kagaku Gijutsu-sha, Токио, Япония ..	http://www.kagaku.com/malt/emalt2.html

15.	<u>Thermo-Calc</u>	<u>Thermo-Calc</u> - software, data and consulting services. Thermo-Calc is employed for all kinds of thermodynamic and phase diagram calculations, especially non-ideal phases and can calculate diagram sections with up to five independent variables, and many other types of diagrams for example CVD depositions, Scheil-Gulliver solidification simulations, partial pressures in gases etc. Databases include the SGTE database with about 200 solutions and 3000 compounds, IRSID database for slags, the Fe-base database for steels, the group III-V database for semiconductor materials, the Saxena geochemical database etc. Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden.	“Термо – Calc” - программное обеспечение, данные и консультативные услуги. “Термо – Calc” используются для всех видов вычислений термодинамических и фазовых диаграмм, особенно не-идеальных фаз ,могут рассчитываться секции диаграммы до пяти независимых переменных, и многие другие типы диаграмм. Базы данных включают данные с приблизительно 200 растворов и 3000 соединений, Saxena geochemical база данных и т.д. Королевский Институт Технологии, Стокгольма, Швеции.	http://www.met.kth.se/tc/
16.	<u>Thermodata</u>	<u>Thermodata</u> - software, data and consulting services featuring Thermoc database of over 44000 bibliographic references; Thermocomp properties of over 4100 pure substances; Thermalloy properties of over 400 binary and 70 multicomponent systems; Coach for manipulating thermochemical properties of elements, substances and reactions; Gemini1 and Gemini2 for calculating the complex chemical equilibria; Thermodata, Domaine Universitaire de Grenoble, Saint Martin d'Herès, France.	Thermodata – программное обеспечение, данные и консультативные услуги, База данных для более чем 44000 библиографических ссылок; термодинамические свойства для 4100 чистых веществ; термальные свойства для 400 бинарных и 70 поликомпонентных систем; способы определения термодинамических свойств элементов, веществ и реакций; Gemini1 и Gemini2 для вычисления комплексного химического равновесия; Thermodata, Domaine Universitaire Grenoble, Святой Мартин d'Herès, Франция.	http://www.grenet.fr/
17.	EQ3/6	AF: British Geological Survey, Fluid Processes Group, Nottingham, SO: Computers & Geosciences. 22; 2, Pages 109-116. PY: 1996 DE: applications-; complexing-; computer-programs; data-processing; geochemistry-; metals-; models-; organic-materials; PHREEQE-; PHREEQEV-; pollutants-; pollution-; waste-disposal; water-resources CC: 22-Environmental-geology; 02C-Geochemistry-of-rocks,-soils,-and-sediments IL: Refs: 24; 5 tables.	AF: Британская Геологическая съемка, Ноттингем, ТАК: Компьютеры и Геологические науки. 22; 2, Страницы 109-116, 1996. :прикладные программы -; компьютерные программы; обработка данных; геохимия -; металлы; модели; органические материалы; загрязняющие вещества -; загрязнение -; водные ресурсы CC: 22-Environmental-geology; 02C-Geochemistry-of-rocks,-soils,-and-sediments	http://www-ep.es.lnl.gov/www-ep/esd/geochem/eq36.html
18.	Thermo-Calc	Computational Thermodynamics (CT) is a new and interdisciplinary science as thermodynamics is involved in many applied sciences. It makes use of <u>computer software</u> and assessed <u>thermodynamic databases</u> to perform realistic calculations of thermodynamic properties of multicomponent system	Используется программное обеспечение и оценка термодинамических баз данных, для выполнения вычислений термодинамических свойств поликомпонентной системы.	http://www.met.kth.se/tc/tc.html

19.	NIST.	NIST thermochemical databases are available both in convenient PC formats and as online systems, notably the NIST Chemistry WebBook which has extensive thermochemical data for over 5000 organic and small inorganic compounds. It also has reaction thermochemistry data for over 8000 reactions and ion energetics data for over 14,000 compounds	NIST термохимические базы данных доступны, и в удобных форматах и как сетевые системы, особенно NIST WebBook по химии, который имеет обширные термохимические данные для более чем 5000 органических и неорганических соединений. И имеются термохимические данные (8000 реакций) и данные для ионов и соединений (14,000).	http://www.nist.gov/srd/thermo.htm
20.	PHREEQE:	TI: PHREEQE; The incorporation of a version of Model V for organic complexation in aqueous solutions into the Speciation Code PHREEQE. AU: Crawford-M-B AF: British Geological Survey, Fluid Processes Group, Nottingham, SO: Computers & Geosciences. 22; 2, Pages 109-116. PY: 1996 DE: applications-; complexing-; computer-programs; data-processing; geochemistry-; metals-; models-; organic-materials; PHREEQE-; PHREEQE-; pollutants-; pollution-; waste-disposal; water-resources CC: 22-Environmental-geology; 02C-Geochemistry-of-rocks,-soils,-and-sediments	PHREEQE; объединение версии Модели V для органических комплексов водных растворов (PHREEQE). AU: Кроуфорд-М-В AF: Британская Геологическая съемка, Ноттингем, ТАК: Компьютеры и Геологические науки. 22; 2, Страницы 109-116. 1996 : прикладные программы -; компьютерные программы; обработка данных; геохимия -; металлы; модели; органические материалы; загрязняющие вещества -; загрязнение -; водные ресурсы CC: 22-Environmental-geology; 02C-Geochemistry-of-rocks,-soils,-and-sediments	http://www.nrcan.gc.ca/gsc/iamg/cg1996.htm
21.	Cambridge Earth Sciences Software	Program to perform thermodynamic calculations on phase diagrams and mineral assemblages. Written by Roger Powell and Tim Holland .	Программа, для расчетов термодинамических и фазовых диаграмм и минеральных соединений. Написанная Роджером Поуеллом и Тимом Холландом.	http://www.esc.cam.ac.uk/software.html
22.	QUILF.	TI: QUILF; a Pascal program to assess equilibria among Fe-Mg-Mn-Ti oxides, pyroxenes, olivine, and quartz. AU: Andersen-David-J; Lindsley-Donald-H; Davidson-Paula-M OS: 10 Jackson Street, Van Buren, ME, United-States; State University of New York, Stony Brook, United-States SO: Computers-and-Geosciences. 19. (9). p. 1333-1350. 20 Refs. YR: 1993 DE: augite-; chain-silicates; clinopyroxene-; computer-programs; data-processing; framework-silicates; fugacity-; geologic-barometry; geologic-thermometry; ilmenite-; magnetite-; nesosilicates-; olivine-; olivine-group; orthopyroxene-; orthosilicates-; oxides-; oxygen-; -crystallography	QUILF; программа, для оценки равновесий среди Fe-Mg-Mn-Ti оксидов, пироксенов, оливинов, и кварца. AU: Андерсен-Давид-Дж; Линдсли-Доналд-Х; Давидсон-Паола-М OS: 10 Jackson Улица, Ван Бурен, МЕ, Соединенные Штаты; Государственный университет Нью-Йорка, Stony Brook, Соединенные Штаты Компьютер. 19. (9). Р. 1333-1350. 20 ссылок. 1993 :цепные силикаты; клинопироксен; компьютерные программы; обработка данных; летучесть -; геологическая барометрия; геологическая термометрия; ильменит -; магнитный железняк -; оливин; оливин-группа; ортопироксен; ортосиликаты; окиси; кислород.	http://www.nrcan.gc.ca/gsc/iamg/cg1993.htm
23.	MELTS	MELTS Melts is a software package for modeling crystallization of magmatic systems. MELTS is written in ANSI C with an X11/Motif Graphical User Interface. Executable versions are available for a wide variety of "UNIX"-level workstations.	Пакет программ для моделирования кристаллизации магматических систем. Написаны в ANSI C с X11/Motif Графическим интерфейсом . Выполнимые версии доступны для широкого круга пользователей ("UNIX").	http://www.geology.washington.edu/~ghiorso/MeltsWWW/

