

УДК 533.1

А. В. Троценко

Одесская государственная академия холода, ул. Дворянская, 1/3, 65026, г. Одесса, Украина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАЛОИССЛЕДОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ

Проанализированы показатели качества кубического уравнения состояния в зависимости от располагаемых наборов опорных данных малоисследованных веществ. Для хорошо изученных технических газов приведены алгоритмы и результаты определения оптимальных выборок из всего массива опорных данных. Показано, что надежное описание термодинамических функций малоисследованных веществ рассмотренным уравнением состояния может быть достигнуто при использовании выборки из пяти точек кривой упругости, взятых в области нормальной температуры кипения.

Ключевые слова: моделирование; уравнение состояния; кривая упругости; опорные данные; выборка.

Quality performances of the cubic equation of state in dependence on available blocks of base data of little-investigated substances are analyzed. For well-investigated industrial gases algorithms and results of finding of optimal samples from the whole of base data are demonstrated. It is shown that trusty values of thermodynamic function calculated from considered equation of state might be obtained when sample consisting five points of saturation curve near normal boiling temperature is used.

Key words: modeling; equation of state; saturation curve; base data; sample.

I. ВВЕДЕНИЕ

Использование в технике новых рабочих тел и успехи в области синтеза новых химических соединений усложняют актуальность проблемы определения термодинамических свойств малоисследованных веществ. К детально изученным можно отнести лишь малое число распространенных рабочих тел криогенной, холодильной и некоторых других отраслей техники. Отсутствие данных о физических свойствах является одним из основных сдерживающих факторов решения ряда важнейших задач химической технологии. Практическая невозможность экспериментального изучения огромного числа веществ, представляющих интерес для техники, выдвигает на первый план развитие методов расчета и прогнозирования их свойств по ограниченному объему опорных данных.

Применительно к термодинамическим свойствам можно условно выделить следующие способы реализации этих методов:

1. Создание обобщенных зависимостей для нахождения отдельных, наиболее важных свойств таких, как критические параметры, термодинамические функции фаз при нормальной температуре кипения, кривая упругости. Систематизация и анализ существующих зависимостей приведены в работах [1–3].

2. Использование метода термодинамического подобия веществ [1, 4]. Данный метод развивается в направлении обоснования выбора критериев подобия, по-

лучения обобщенных зависимостей для приведенных термодинамических свойств и параметров уравнения состояния.

3. Расчет термодинамических свойств веществ с помощью малопараметрических, прежде всего кубических уравнений состояния (КУС). Разработка таких видов уравнения состояния позволяет ограничиться минимальным объемом экспериментальной информации о моделируемом веществе и обеспечивает приемлемую для многих технических задач точность.

Указанные выше способы определения термодинамических свойств малоисследованных веществ взаимосвязаны, и выбор одного из них обусловлен спецификой конкретно решаемой технической задачи. Для расчета процессов и циклов, протекающих в широком диапазоне температур и давлений, наиболее целесообразно применение КУС с созданием обобщенных зависимостей для их параметров. Это обеспечивает определение термодинамически согласованных результатов при минимальных затратах времени на разработку модели уравнения состояния.

Несмотря на накопленный опыт использования КУС при решении разнообразных технических проблем все еще остаются без ответа ряд задач, связанных с определением параметров данного вида уравнения состояния для малоизученных веществ. К ним, в частности, относится выбор опорных данных, достаточных для нахождения надежных значений параметров КУС. В данной работе эта проблема исследуется для уравнения состояния технических газов, представленного в [5].