

РАСЧЁТ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИОПРОДУКТОВ С ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТЬЮ

Зайцев А.В., Кудашов В.Н., Кудашова Н.В.

zai_@inbox.ru

Санкт-Петербургский государственный университет
низкотемпературных и пищевых технологий;
Завод радиотехнического оборудования

Повышенные требования к точности определения теплофизических свойств веществ при компьютерных расчётах различных процессов и устройств предполагают необходимость выбора соответствующих методик расчёта. Предлагается фортрановская программа расчёта теплофизических свойств криовеществ в газообразном и жидком состояниях, основанная на надёжных эмпирических уравнениях.

Ключевые слова: теплофизические свойства, фазовое равновесие, алгоритм, уравнение состояния.

Extra Accuracy Calculation of Thermal Properties of Cryogenic Products

Zaitsev A.V., Kudashov V.N., Kudashova N.V.

St. Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics,
Institute of Refrigeration and Biotechnologies

Rising the accuracy requirements of defining thermophysical properties of substances with using computer calculations of various processes and devices assume the need of choosing corresponding design techniques.

Here is offered the Fortran-program of calculating thermophysical properties of cryogenic products in the gaseous and liquid conditions based on the reliable empirical equations.

Keywords: thermophysical properties, phase balance, algorithm, condition equation.

1. Рассмотрим эмпирическое уравнение состояния реального вещества

$$pv = zRT, \quad (1)$$

где p – давление, v – удельный объём, z – коэффициент сжимаемости, R – газовая постоянная, T – температура. Перепишем уравнение (1) в приведённых координатах

$$\pi = p / p_{кр}, \quad \omega = \rho / \rho_{кр}, \quad \tau = T / T_{кр}.$$

Здесь π , ω , τ – приведённые давление, плотность, температура, а $p_{кр}$, $\rho_{кр}$, $T_{кр}$ – соответствующие критические параметры. Получим

$$\pi = \omega \tau z / z_{кр}, \quad z_{кр} = \frac{p_{кр}}{RT_{кр} \rho_{кр}}. \quad (2)$$

Будем использовать уравнение состояния в следующем виде [3–6]:

$$z = 1 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} b_{ij} \frac{\omega^i}{\tau^j}. \quad (3)$$

Уравнения вида (3) хорошо описывают поведение вещества в газообразном и жидком состояниях.

2. Расчёт теплофизических свойств для уравнения состояния вида (3) осуществляется по хорошо известным формулам термодинамики [1, 2]. Запишем для примера формулы для вычисления энтропии и энтальпии:

$$s = s_0 + R \ln \frac{\omega}{\omega_0} + R \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} \frac{j-1}{i} b_{ij} \frac{\omega^i}{\tau^j}, \quad (4)$$

$$h = h_0 + RT \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} \frac{i+j}{i} b_{ij} \frac{\omega^i}{\tau^j}, \quad (5)$$

где $\omega_0 = p_{см} / RT \rho_{кр}$, $p_{см} = 0,101325 \text{ МПа}$ и s_0 , h_0 – энтропия, энтальпия в идеально-газовом состоянии. Зная энтропию и энтальпию, легко найти внутреннюю энергию u , функцию Гельмгольца, функцию Гиббса по формулам

$$u = h - zRT, \quad (6)$$

$$F = u - Ts, \quad (7)$$

$$\Phi = h - Ts. \quad (8)$$

3. Как видно из (4), (5), для вычисления теплофизических свойств вещества необходимо знать плотность ω . Плотность ω в однофазной области при известных значениях π , τ определяется из уравнения:

$$\pi - \frac{\omega \tau}{z_{кр}} \left(1 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} b_{ij} \frac{\omega^i}{\tau^j} \right) = 0. \quad (9)$$

Уравнение (6) решается численно пошаговым методом половинного деления.

На линии насыщения (кипения) находятся в равновесии жидкость и пар. Из условий равновесия газовой и жидкой сред следует (см. [2])

$$\begin{cases} \tau' = \tau'' = \tau_s; \\ \pi' = \pi'' = \pi_s; \\ \varphi' = \varphi'' = \varphi_s, \end{cases} \quad (10)$$

где φ – химический потенциал. Одним штрихом отмечены параметры, относящиеся к жидкой среде, двумя штрихами – к газовой среде. Параметры с индексом s относятся к линии насыщения.

Если производится расчёт в зависимости от температуры, то из (10) вытекают уравнения для нахождения неизвестных плотностей жидкой и газовой сред

$$\begin{cases} \omega' - \omega'' + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} b_{ij} \frac{\omega'^{i+1} - \omega''^{i+1}}{\tau_s^j} = 0; \\ \ln \frac{\omega'}{\omega''} + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} \frac{i+1}{i} b_{ij} \frac{\omega'^i - \omega''^i}{\tau_s^j} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Если производится расчёт в зависимости от давления, то получается система из трёх уравнений для поиска температуры и плотностей жидкой и газовой сред

$$\begin{cases} \pi_s - \frac{\omega' \tau_s}{z_{кр}} \left(1 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} b_{ij} \omega'^{i+1} / \tau_s^j \right) = 0; \\ \pi_s - \frac{\omega'' \tau_s}{z_{кр}} \left(1 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} b_{ij} \omega''^{i+1} / \tau_s^j \right) = 0; \\ \ln \frac{\omega'}{\omega''} + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^{s_i} \frac{i+1}{i} b_{ij} \frac{\omega'^i - \omega''^i}{\tau_s^j} = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Системы (11) и (12) решаются обычным методом Ньютона.

4. Программа расчёта реализована на алгоритмическом языке Fortran-95. В программе присутствует специальный регулируемый параметр FEPS равный абсолютному значению правой части уравнения (9) или наибольшему из абсолютных значений правых частей уравнений систем (11) и (12). В нашей программе FEPS=10⁻¹².

Для азота программа рассчитывает теплофизические свойства в интервале температур от тройной точки до 1500K и 0,01МПа ≤ p ≤ 100МПа (см. [3]),

для воздуха $70K \leq T \leq 1500K$ и $0,01MПа \leq p \leq 100MПа$ (см. [4]), для кислорода $T_{mp} \leq T \leq 1500K$ и $0,1MПа \leq p \leq 100MПа$ (см. [5]), для метана $T_{mp} \leq T \leq 1000K$ и $0,1MПа \leq p \leq 100MПа$ (см. [6]).

Список литературы:

1. Вукалович М.П., Новиков И.И. Термодинамика. – М.: Машиностроение, 1972. – 672 с.
2. Кириллин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 416 с.
3. Термодинамические свойства азота/Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. – М.: Изд-во стандартов, 1977. – 352 с.
4. Термодинамические свойства воздуха/Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. – М.: Изд-во стандартов, 1978. – 276 с.
5. Термодинамические свойства кислорода/Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. – М.: Изд-во стандартов, 1981, – 304 с.
6. Термодинамические свойства метана/Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. – М.: Изд-во стандартов, 1979. – 348 с.