

А.В. Русанов, д.т.н., профессор, академик Инженерной академии Украины, зам. директора по научной работе (Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, г. Харьков), П. Лампарт, д.т.н., зав. отделом «Аэродинамики турбин» (Институт проточных машин им. Р. Шевальского Польской Академии Наук, г. Гданьск, Польша), Р.А. Русанов, ведущий инженер, отдел «Гидроаэромеханики энергетических машин» (Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, г. Харьков)

Интерполяционно-аналитическая аппроксимация модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина для учета реальных свойств рабочих тел в трехмерных расчетах

Приведен вид модифицированного термического уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина с 32 членами, а также полученных на его основе термодинамических функций. Разработан метод интерполяционно-аналитической аппроксимации модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина для учета реальных свойств рабочих тел в трехмерных расчетах, который, с одной стороны, позволяет обеспечить достаточную точность, а с другой – не требует существенного увеличения вычислительных затрат. Представлены способ определения констант уравнения состояния на основе имеющихся полей термодинамических величин, а также апробация предложенного подхода.

Ключевые слова: уравнение состояния Бенедикта-Вебба-Рубина, интерполяционно-аналитическая аппроксимация, свободная энергия Гельмгольца.

Наведено вид модифікованого термічного рівняння стану Бенедикта-Вебба-Рубіна з 32 членами, а також отриманих на його основі термодинамічних функцій. Розроблено метод інтерполяційно-аналітичної апроксимації модифікованого рівняння стану Бенедикта-Вебба-Рубіна для врахування реальних властивостей робочих тіл у тривимірних розрахунках, який, з одного боку, дозволяє забезпечити достатню точність, а з другого – не вимагає істотного збільшення обчислювальних витрат. Представлено спосіб визначення констант рівняння стану на основі наявних полів термодинамічних величин, а також апробация запропонованого підходу.

Ключові слова: рівняння стану Бенедикта-Вебба-Рубіна, інтерполяційно-аналітична апроксимація, вільна енергія Гельмгольца.

The paper describes a modified form of the Benedict-Webb-Rubin thermal equation of state with 32 members and received on the basis of its thermodynamic functions. Developed a method of interpolation-analytical approximation of the modified Benedict-Webb-Rubin equation of state to account for the real properties of working medium in 3D calculations, which on the one hand allows for sufficient accuracy, and on the other - does not require a significant increase in computational cost. Shows how to determine the equation of state of the constants on the basis of thermodynamic quantities of fields, and testing of the proposed approach.

Keywords: Benedict-Webb-Rubin equation of state, interpolation-analytical approximation, the free energy Helmholtz.

В последние десятилетия методы вычислительной газодинамики широко применяются в различных областях науки и техники: энергетическом машиностроении, авиации и космонавтике, химической промышленности, нефте-газодобыче и др.

При моделировании пространственных газодинамических процессов на основе численного интегрирования уравнений Рейнольдса необходимо выполнить замыкание этих уравнений, т.е. установить связь между термодинамическими величинами. Для этих целей используются уравнения состояния, от выбора которых существенно зависит достоверность получаемых результатов.

В настоящее время наиболее распространенными уравнениями состояния, используемыми в трехмерных расчетах, являются уравнения совершенного газа Таммана и Ван-дер-Ваальса. Во многих случаях их применение оправдано и обеспечивает приемлемые результаты. Однако, когда имеют ме-

сто фазовые переходы либо рассматриваемые процессы проходят в широком диапазоне изменяемых параметров, точность моделирования существенно уменьшается.

Различные модификации уравнения Бенедикта-Вебба-Рубина являются одним из наиболее универсальных и достоверных уравнений состояния. Однако прямое использование этих уравнений в трехмерных расчетах в настоящее время не представляется возможным, т.к. в этом случае время вычислительного процесса возрастает на 1,5 – 2 порядка.

В статье рассмотрен вид одной из наиболее точных модификаций термического уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина – с 32 членами, а также полученных на его основе термодинамических функций. Представлен интерполяционно-аналитический метод аппроксимации сложных термодинамических функций, который, с одной стороны, позволяет обеспечить достаточную точность, а с другой – не требует существенного увеличения вы-

числительных затрат. Показан способ определения констант модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина с 32 членами на основе имеющихся полей термодинамических величин, а также приведены результаты апробации предложенного подхода.

Модифицированное уравнение состояния Бенедикта-Вебба-Рубина. Основные термодинамические функции

Термическое модифицированное уравнение состояния Бенедикта-Вебба-Рубина с 32 членами [1] имеет вид:

$$\begin{aligned}
 P = & \rho RT + \\
 & + \rho^2 \left[G(1)T + G(2)T^{1/2} + G(3) + \frac{G(4)}{T} + \frac{G(5)}{T^2} \right] + \\
 & + \rho^3 \left[G(6)T + G(7) + \frac{G(8)}{T} + \frac{G(9)}{T^2} \right] \\
 & + \rho^4 \left[G(10)T + G(11) + \frac{G(12)}{T} \right] + \\
 & + \rho^5 \left[G(13) \right] + \rho^6 \left[\frac{G(14)}{T} + \frac{G(15)}{T^2} \right] + \rho^7 \left[\frac{G(16)}{T} \right] \\
 & + \rho^8 \left[\frac{G(17)}{T} + \frac{G(18)}{T^2} \right] + \rho^9 \left[\frac{G(19)}{T^2} \right] \\
 & + \rho^3 \left[\frac{G(20)}{T^2} + \frac{G(21)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^5 \left[\frac{G(22)}{T^2} + \frac{G(23)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^7 \left[\frac{G(24)}{T^2} + \frac{G(25)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^9 \left[\frac{G(26)}{T^2} + \frac{G(27)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) \\
 & + \rho^{11} \left[\frac{G(28)}{T^2} + \frac{G(29)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^{13} \left[\frac{G(30)}{T^2} + \frac{G(31)}{T^3} + \frac{G(32)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2), \quad (1)
 \end{aligned}$$

где R , γ , G – константы, P – давление, ρ – плотность, T – температура.

Для выполнения моделирования пространственных вязких течений необходимо знать термодинамические

зависимости для следующих величин: u – внутренняя энергия; $h = u + \frac{P}{\rho}$ – энтальпия; c_v, c_p – изохорная и изобарная теплоемкости соответственно; S – энтропия; a – скорость звука. Для определения этих зависимостей используются дифференциальные уравнения термодинамики [2], соотношение (1), а также зависимость для свободной энергии Гельмгольца – f . Связь между свободной энергией Гельмгольца и уравнением (1) устанавливается выражением:

$$P = \rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_T. \quad (2)$$

Соотношение (2) допускает наличие в выражении для f произвольного многочлена от переменной T . В настоящей работе выражение для свободной энергии Гельмгольца принято в виде:

$$f = f_i + f_v, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned}
 f_i = & RT \ln(\rho) + \rho \left[G(1)T + G(2)\sqrt{T} + G(3) + \right. \\
 & + \frac{G(4)}{T} + \frac{G(5)}{T^2} \left. + \frac{\rho^2}{2} \left[G(6)T + G(7) + \frac{G(8)}{T} + \frac{G(9)}{T^2} \right] \right. \\
 & + \frac{\rho^3}{3} \left[G(10)T + G(11) + \frac{G(12)}{T} \right] + \frac{\rho^4}{4} G(13) + \\
 & + \frac{\rho^5}{5} \left[\frac{G(14)}{T} + \frac{G(15)}{T^2} \right] + \frac{\rho^6}{6} \frac{G(16)}{T} \\
 & + \frac{\rho^7}{7} \left[\frac{G(17)}{T} + \frac{G(18)}{T^2} \right] + \frac{\rho^8}{8} \frac{G(19)}{T^2} + \frac{G(33)}{T} + \\
 & + G(34)T + G(35)T^2 + G(36)T \ln(T) + G(37); \\
 f_v = & I_1 \left[\frac{G(20)}{T^2} + \frac{G(21)}{T^3} \right] + I_2 \left[\frac{G(22)}{T^2} + \frac{G(23)}{T^4} \right] + \\
 & + I_3 \left[\frac{G(24)}{T^2} + \frac{G(25)}{T^3} \right] + I_4 \left[\frac{G(26)}{T^2} + \frac{G(27)}{T^4} \right] + \\
 & + I_5 \left[\frac{G(28)}{T^2} + \frac{G(29)}{T^3} \right] + I_6 \left[\frac{G(30)}{T^2} + \frac{G(31)}{T^3} + \frac{G(32)}{T^4} \right]; \\
 I_1 = & \int \rho \exp(\gamma\rho^2) d\rho = \frac{1}{2\gamma} \exp(\gamma\rho^2); \\
 I_2 = & \int \rho^3 \exp(\gamma\rho^2) d\rho = \frac{\gamma\rho^2 - 1}{2\gamma^2} \exp(\gamma\rho^2); \\
 I_3 = & \int \rho^5 \exp(\gamma\rho^2) d\rho = \frac{\gamma^2\rho^4 - 2\gamma\rho^2 + 2}{2\gamma^3} \exp(\gamma\rho^2);
 \end{aligned}$$

$$I_4 = \int \rho^7 \exp(\gamma \rho^2) d\rho = \frac{\gamma^3 \rho^6 - 3\gamma^2 \rho^4 + 6\gamma \rho^2 - 6}{2\gamma^4} \exp(\gamma \rho^2);$$

$$I_5 = \int \rho^9 \exp(\gamma \rho^2) d\rho = \frac{\gamma^4 \rho^8 - 4\gamma^3 \rho^6 + 12\gamma^2 \rho^4 - 24\gamma \rho^2 + 24}{2\gamma^5} \exp(\gamma \rho^2);$$

$$I_6 = \int \rho^{11} \exp(\gamma \rho^2) d\rho =$$

$$= \frac{\gamma^5 \rho^{10} - 5\gamma^4 \rho^8 + 20\gamma^3 \rho^6 - 60\gamma^2 \rho^4 + 120\gamma \rho^2 - 120}{2\gamma^6} \exp(\gamma \rho^2).$$

В выражение (3) введен дополнительный полином от переменной T , содержащий пять членов, что привело к увеличению числа констант G с 32 до 37.

С учетом (1) и (3) искомые термодинамические функции примут вид, приведенный ниже.

Внутренняя энергия:

$$u = f - T \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho, \quad (4)$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho = \left(\frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_\rho + \left(\frac{\partial f_v}{\partial T} \right)_\rho;$$

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_\rho = R \ln(\rho) + \rho \left[G(1) + \frac{1}{2} \frac{G(2)}{\sqrt{T}} - \frac{G(4)}{T^2} - 2 \frac{G(5)}{T^3} \right] +$$

$$+ \frac{\rho^2}{2} \left[G(6) - \frac{G(8)}{T^2} - 2 \frac{G(9)}{T^3} \right]$$

$$+ \frac{\rho^3}{3} \left[G(10) - \frac{G(12)}{T^2} \right] + \frac{\rho^5}{5} \left[-\frac{G(14)}{T^2} - 2 \frac{G(15)}{T^3} \right] -$$

$$- \frac{\rho^6}{6} \frac{G(16)}{T^2} + \frac{\rho^7}{7} \left[-\frac{G(17)}{T^2} - 2 \frac{G(18)}{T^3} \right]$$

$$- \frac{\rho^8}{4} \frac{G(19)}{T^3} - \frac{G(33)}{T^2} + G(34) + 2G(35)T + G(36) + G(36) \ln(T);$$

$$\left(\frac{\partial f_v}{\partial T} \right)_\rho = I_1 \left[-2 \frac{G(20)}{T^3} - 3 \frac{G(21)}{T^4} \right] +$$

$$+ I_2 \left[-2 \frac{G(22)}{T^3} - 4 \frac{G(23)}{T^5} \right] + I_3 \left[-2 \frac{G(24)}{T^3} - 3 \frac{G(25)}{T^4} \right]$$

$$+ I_4 \left[-2 \frac{G(26)}{T^3} - 4 \frac{G(27)}{T^5} \right] + I_5 \left[-2 \frac{G(28)}{T^3} - 3 \frac{G(29)}{T^4} \right] +$$

$$+ I_6 \left[-2 \frac{G(30)}{T^3} - 3 \frac{G(31)}{T^4} - 4 \frac{G(32)}{T^5} \right].$$

Изохорная теплоемкость:

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_\rho = \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho - T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_\rho = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_\rho, \quad (5)$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_\rho = \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial T^2} \right)_\rho + \left(\frac{\partial^2 f_v}{\partial T^2} \right)_\rho;$$

$$\left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial T^2} \right)_\rho = \rho \left[-\frac{1}{4} \frac{G(2)}{T^2} + 2 \frac{G(4)}{T^3} + 6 \frac{G(5)}{T^4} \right] +$$

$$+ \frac{\rho^2}{2} \left[2 \frac{G(8)}{T^3} + 6 \frac{G(9)}{T^4} \right] + \frac{2}{3} \rho^3 \frac{G(12)}{T^3}$$

$$+ \frac{\rho^5}{5} \left[2 \frac{G(14)}{T^3} + 6 \frac{G(15)}{T^4} \right] + \frac{\rho^6}{3} \frac{G(16)}{T^3} +$$

$$+ \frac{\rho^7}{7} \left[2 \frac{G(17)}{T^3} + 6 \frac{G(18)}{T^4} \right] + \frac{3}{4} \rho^8 \frac{G(19)}{T^4}$$

$$+ 2 \frac{G(33)}{T^3} + 2G(35) + \frac{G(36)}{T};$$

$$\left(\frac{\partial^2 f_v}{\partial T^2} \right)_\rho = I_1 \left[6 \frac{G(20)}{T^4} + 12 \frac{G(21)}{T^5} \right] +$$

$$+ I_2 \left[6 \frac{G(22)}{T^4} + 20 \frac{G(23)}{T^6} \right] + I_3 \left[6 \frac{G(24)}{T^4} + 12 \frac{G(25)}{T^5} \right]$$

$$+ I_4 \left[6 \frac{G(26)}{T^4} + 20 \frac{G(27)}{T^6} \right] + I_5 \left[6 \frac{G(28)}{T^4} + 12 \frac{G(29)}{T^5} \right] +$$

$$+ I_6 \left[6 \frac{G(30)}{T^4} + 12 \frac{G(31)}{T^5} + 20 \frac{G(32)}{T^6} \right].$$

Изобарная теплоемкость:

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \frac{\partial}{\partial T} \left[\left(u + \frac{P}{\rho} \right) \right]_p =$$

$$= \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_p - \frac{P}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_p - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho -$$

$$- T \left[\frac{\partial \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho}{\partial T} \right]_p - \frac{P}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = -T \left[\frac{\partial \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho}{\partial T} \right]_p =$$

$$= -T \left[\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_\rho + \frac{A}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right] =$$

$$-T \left[\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_\rho - \frac{A^2}{\rho^2 B} \right] = c_v + \frac{A^2 T}{\rho^2 B}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned}
 A = & \rho R + \rho^2 \left[G(1) + \frac{1}{2} \frac{G(2)}{\sqrt{T}} - \frac{G(4)}{T^2} - 2 \frac{G(5)}{T^3} \right] + \\
 & + \rho^3 \left[G(6) - \frac{G(8)}{T^2} - 2 \frac{G(9)}{T^3} \right] + \rho^4 \left[G(10) - \frac{G(12)}{T^2} \right] + \\
 & + \rho^6 \left[-\frac{G(14)}{T^2} - 2 \frac{G(15)}{T^3} \right] - \rho^7 \left[\frac{G(16)}{T^2} \right] + \\
 & + \rho^8 \left[-\frac{G(17)}{T^2} - 2 \frac{G(18)}{T^3} \right] - 2\rho^9 \left[\frac{G(19)}{T^3} \right] + \\
 & + \rho^3 \left[-2 \frac{G(20)}{T^3} - 3 \frac{G(21)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^5 \left[-2 \frac{G(22)}{T^3} - 4 \frac{G(23)}{T^5} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^7 \left[-2 \frac{G(24)}{T^3} - 3 \frac{G(25)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^9 \left[-2 \frac{G(26)}{T^3} - 4 \frac{G(27)}{T^5} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^{11} \left[-2 \frac{G(28)}{T^3} - 3 \frac{G(29)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + \rho^{13} \left[-2 \frac{G(30)}{T^3} - 3 \frac{G(31)}{T^4} - 4 \frac{G(32)}{T^5} \right] \exp(\gamma\rho^2);
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B = & RT + \left[2\rho G(1)T + G(2)\sqrt{T} + G(3) + \frac{G(4)}{T} + \frac{G(5)}{T^2} \right] + \\
 & + 3\rho^2 \left[G(6)T + G(7) + \frac{G(8)}{T} + \frac{G(9)}{T^2} \right] + \\
 & + 4\rho^3 \left[G(10)T + G(11) + \frac{G(12)}{T} \right] + 5\rho^4 \left[G(13) \right] + \\
 & + 6\rho^5 \left[\frac{G(14)}{T} + \frac{G(15)}{T^2} \right] + 7\rho^6 \left[\frac{G(16)}{T} \right] + \\
 & + 8\rho^7 \left[\frac{G(17)}{T} + \frac{G(18)}{T^2} \right] + 9\rho^8 \left[\frac{G(19)}{T} \right] + \\
 & + (3\rho^2 + 2\gamma\rho^4) \left[\frac{G(20)}{T^2} + \frac{G(21)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + (5\rho^4 + 2\gamma\rho^6) \left[\frac{G(22)}{T^2} + \frac{G(23)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + (7\rho^6 + 2\gamma\rho^8) \left[\frac{G(24)}{T^2} + \frac{G(25)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + (9\rho^8 + 2\gamma\rho^{10}) \left[\frac{G(26)}{T^2} + \frac{G(27)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + (11\rho^{10} + 2\gamma\rho^{12}) \left[\frac{G(28)}{T^2} + \frac{G(29)}{T^3} \right] \exp(\gamma\rho^2) + \\
 & + (13\rho^{12} + 2\gamma\rho^{14}) \left[\frac{G(30)}{T^2} + \frac{G(31)}{T^3} + \frac{G(32)}{T^4} \right] \exp(\gamma\rho^2).
 \end{aligned}$$

Энтродия:

$$S = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho. \quad (7)$$

Скорость звука:

$$\begin{aligned}
 \alpha^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s &= \frac{T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho + c_v \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P}{\rho^2 c_v \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P} = \\
 &= \frac{T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho + c_v \rho^2 \frac{\partial T}{\partial \rho}}{\rho^2 c_v \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P} = B + \frac{TA^2}{c_v \rho^2}. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Метод интерполяционно-аналитической аппроксимации термодинамических функций

Впервые данный метод был применен для учета в трехмерных расчетах термодинамических свойств воды и водяного пара на основе уравнения состояния IAPWS-95 [3,4]. Согласно этому подходу искомые термодинамические функции определяются по аналитико-интерполяционным зависимостям:

$$T = \frac{p}{\rho R z_t(\rho, p)}; \rho = \frac{p}{h} z_\rho(h, p); u = \frac{p}{\rho} z_u(\rho, p);$$

$$p = \rho \cdot u \cdot z_p(\rho, u); a = \sqrt{\frac{p}{\rho} z_a(\rho, p)};$$

$$h = \frac{p}{\rho} \left(1 + \frac{z_u(\rho, p)}{z_t(\rho, p)} \right); C_v = R \cdot z_{C_v}(\rho, p);$$

$$S = R \cdot z_S(\rho, p); u_p = \frac{z_u(\rho, p)}{\rho \cdot z_t(\rho, p)};$$

$$u_p = -\frac{p z_u(\rho, p)}{\rho z_t(\rho, p)}; S_p = \frac{C_v}{p};$$

$$S_p = -\frac{C_p}{p}; T_p = \frac{1}{\rho R \cdot z_t(\rho, p)}; T_p = -\frac{p}{\rho^2 R \cdot z_t(\rho, p)}, \quad (9)$$

где $z_t(\rho, p)$, $z_\rho(h, p)$, $z_u(\rho, p)$, $z_p(\rho, u)$, $z_{C_v}(\rho, p)$, $z_{C_p}(\rho, p)$, $z_S(\rho, p)$ – безразмерные коэффициенты сжимаемости для соответствующих термодинамических величин, определяемые с помощью интерполяции по заранее насчитанным массивам базовых точек. Для уменьшения размерностей массивов без ущерба для точности независимые переменные от давления и плотности рассматриваются в логарифмической шкале.

Величины безразмерных коэффициентов сжимаемости в базовых точках определяются как:

$$z_t = \frac{p}{\rho RT}; z_u = \frac{u}{RT}; z_\rho = \frac{h\rho}{p}; z_p = \frac{p}{\rho \cdot u};$$

$$z_a = \frac{a^2}{RT}; z_{C_v} = \frac{C_v}{R}; z_{C_p} = \frac{C_p}{R}; z_S = \frac{S}{R}, \quad (10)$$

где соответствующие величины $p, \rho, T, u, h, a, C_p, C_v$ и S вычисляются с помощью термодинамических соотношений (1, 4 - 8).

Определение констант уравнения состояния.

Апробация

Константы для уравнений состояния, как правило, определяются на основе экспериментальных данных. В литературе имеется информация о значении констант для различных рабочих тел применительно к простым уравнениям состояния. Для модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина с 32 членами открытая информация о значениях констант присутствует для узкого набора рабочих тел. Однако существует различное программное обеспечение, позволяющее рассчитать массивы полей термодинамических величин для достаточно широкого набора рабочих тел. Теоретически эти массивы можно напрямую использовать при определении коэффициентов (10), но, как правило, с помощью существующего программного обеспечения реально получить массивы, размерность которых несколько сотен точек, а для обеспечения необходимой точности трехмерных газодинамических расчетов размерность массивов обычно составляет несколько миллионов. Поэтому целесообразно в качестве промежуточного действия на основе полученных массивов термодинамических величин определить необходимые константы уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина, а далее с помощью соотношений (1, 4 - 8) рассчитать новые массивы нужной размерности.

Значение константы газовой постоянной R определяется как отношение универсальной газовой постоянной к молекулярной массе рассматриваемого рабочего тела. Остальные константы γ, G определяются с помощью метода наименьших квадратов [5, 6], согласно которому находится наименьшее квадратичное отклонение безразмерной искомой функции от массива контрольных точек:

$$\sum_{i=1}^n \frac{f_i - y_i}{y_i}^2 \rightarrow \min, \quad (12)$$

где f_i – искомая термодинамическая функция модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина в точке i , y_i – значение термодинамической величины в точке i из массива контрольных точек, n – размерность массива контрольных точек. Решение задачи (12) определяется следующим образом, если константу γ считать известной, то условие (12) будет выполнено (для заданной γ) при:

$$\sum_{i=1}^n \frac{f_i - y_i}{y_i^2} \frac{\partial f_i}{\partial G_j} = 0, \quad (13)$$

где j – номер константы G .

Выражение (13) является системой 37 линейных уравнений относительно 37 неизвестных G для термодинамических функций: давления, свободной энергии Гельмгольца, энтропии и частной производной давления от плотности при постоянной температуре. Линейная система уравнений (13) решается методом Гаусса с преобладающим диагональным членом [5, 6], с точностью вычислений 32 знака (четверная точность). Такая большая мантисса нужна для обеспечения необходимой точности. Глобальный поиск решения (12) выполняется варьированием γ в диапазоне:

$$-100\rho_*^2 \leq \gamma \leq 100\rho_*^2, \quad (14)$$

где ρ_* – значение плотности в критической точке.

Константы находятся при условии одновременного выполнения (12) для термодинамических функций: давление, свободная энергия Гельмгольца, энтропия и частная производная давления от плотности при постоянной температуре.

В качестве примера были определены значения констант для рабочего тела – «силиконовое масло», применяемого в когенерационной установке малой мощности [7, 8]. Как исходные данные брались термодинамические массивы, полученные с помощью программы REFPROP [9] в 735 точках во всем диапазоне изменения величин: температура от 187 до 673 К и давление до 30 МПа. Получены следующие значения констант:

$$R=0.3515168000E+02;$$

$$\gamma = -0.262270170807420121513573739971D-04$$

G(01)= 0.302207868111278740060411592544D+00
 G(02)= -0.495233944170545289062576542307D+01
 G(03)= -0.225501201197491314642998011829D+03
 G(04)= 0.107906234213802120996678810443D+06
 G(05)= -0.372657132543797518687633762851D+08
 G(06)= -0.627320725108084212417049028312D-03
 G(07)= 0.215743936748432144179678929724D+01
 G(08)= -0.192205460461420765746900736543D+04
 G(09)= 0.517361137204233382712063500157D+06
 G(10)= 0.766264823125748039322791551715D-06
 G(11)= -0.434353699956369187362735134447D-02
 G(12)= 0.161657815774704243989178292974D+01
 G(13)= 0.288814234808349750753865171475D-05
 G(14)= 0.227250568997175780038146727298D-04
 G(15)= -0.652886158820518451942746541068D-02
 G(16)= -0.456739733049471206918455720386D-07
 G(17)= 0.231242587293920118661113372857D-10
 G(18)= 0.186380264921967994590840358405D-07
 G(19)= -0.126528342901003631469807144831D-10
 G(20)= 0.347527618252179836075855868907D+06
 G(21)= -0.160950582611693360862236427413D+09
 G(22)= 0.693289101786031245959518372491D+01
 G(23)= -0.953438468030805490987102326088D+06
 G(24)= 0.297824147414970198157551618564D-03
 G(25)= -0.230534235531245981576803850333D+00
 G(26)= -0.213236230412490644485878013528D-08
 G(27)= 0.167631613366536556924666638381D-02
 G(28)= 0.904911503767510905693979818203D-13
 G(29)= -0.704815505181047779157572048773D-10
 G(30)= -0.501394975086843725544491118562D-18
 G(31)= 0.454671117815342747169810491557D-15
 G(32)= -0.539871248063102930246035212608D-13
 G(33)= 0.117126880134545422586004289266D+09
 G(34)= 0.140470196549871558017639577219D+05
 G(35)= -0.469999084243383589981287193248D+00
 G(36)= -0.193705173670445390344105907111D+04
 G(37)= -0.116961966600901591984328215895D+07. (15)

При полученных константах (15) обеспечивается среднеквадратичное отклонение термодинамических функций (1, 4 - 8) от массивов контрольных точек – 0,02%, а максимальное квадратичное отклонение – 0,17%.

Выводы

Разработан метод интерполяционно-аналитической аппроксимации модифицированного уравнения со-

стояния Бенедикта-Вебба-Рубина для учета реальных свойств рабочих тел в трехмерных расчетах, который, с одной стороны, позволяет обеспечить достаточную точность, а с другой – не требует существенного увеличения вычислительных затрат. Представлен способ определения констант модифицированного уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина с 32 членами на основе имеющихся полей термодинамических величин. На примере рабочего тела – «силиконовое масло» показано, что рассматриваемое уравнение состояния с предложенным способом определения констант обеспечивает погрешность среднеквадратичного отклонения – 0,02%, а максимального квадратичного отклонения – 0,17%.

Список литературы:

1. Younglove, B.A. *Thermophysical Properties of Fluids II Methane, Ethane, Propane, Isobutane, and Normal Butane [Text]* / B.A. Younglove, J. F. Ely // *Journal of Physical and Chemical Reference*. –1987. – Data 16. – 577 p.
2. Нащокин В.В. *Техническая термодинамика и теплопередача [Текст]* / В.В. Нащокин. – М.: Высшая школа, 1980. – 496 с.
3. IAPWS, *Revised Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use*. – Available from: <http://www.iapws.org>.
4. Русанов, А.В. *Интерполяционно-аналитический метод учета реальных свойств газов и жидкостей [Текст]* / А.В. Русанов // *Восточно-Европейский журнал передовых технологий*. – 2013. – № 3/10 (63). – С. 53–57. – ISSN 1729-3774
5. Самарский А.А. *Численные методы [Текст]* / А.А. Самарский, А.В. Гулин // М.: Наука, 1989. – 432 с.
6. Волков Е.А. *Численные методы [Текст]: Учеб. пособие для вузов / Е.А. Волков*. – М.: Наука, 1987. – 248 с.
7. Русанов А.В. *Разработка проточной части турбины для когенерационной установки, использующей низкокипящие рабочие тела [Текст]* / А.В. Русанов, П. Лампарт, Р.А. Русанов, М. Шиманяк // *Вестн. Двигателестроения*, 2013. – Вып. 2. – С. 35 – 44.
8. *Elaboration of the flow system for a cogeneration ORC turbine* / A. Rusanov, P. Lampart, R. Rusanov, S. Bykuc [Text]: *Proc 12th Conf on Power System Engineering, Thermodynamics & Fluid Flow - ES 2013, 13 – 14 June 2013, Pilzen, Czech Republic / Publisher: University of West Bohemia*. – Pilzen, 2013 – 10 p.
9. REFPROP, *National Institute of Standards and Technology Standard Reference Database Number 23*. – Available from: <http://www.nist.gov/srd/nist23.htm>.