

Міністерство освіти і науки України
Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського
"Харківський авіаційний інститут"

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Воробйова Ганна Сергіївна

УДК 621.515.1:533(043)

ДИСЕРТАЦІЯ

Модифікація рівняння стану реального газу для моделювання робочих процесів
у відцентровому компресорі поблизу критичної точки CO₂

Спеціальність 142 Енергетичне машинобудування
Галузь знань 14 Електрична інженерія

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів
і тестів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

Воробйова Ганна Сергіївна

Науковий керівник (консультант) Долматов Дмитро Анатолійович, д. т.н.

Харків - 2025

АНОТАЦІЯ

Воробйова Г. С. Модифікація рівняння стану реального газу для моделювання робочих процесів у відцентровому компресорі поблизу критичної точки CO_2 . – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 142 Енергетичне машинобудування (14 Електрична інженерія). – Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Харків, 2025.

Дисертаційна робота присвячена актуальній задачі забезпечення аналізу робочих процесів в енергетичному обладнанні, яке використовує двоокис вуглецю, в області навколо критичної точки робочого тіла, вибору та модифікації рівняння стану реального газу.

У роботі аналізуються проблеми моделювання процесів стискання CO_2 у відцентровому компресорі, які здійснюються в безпосередній близькості до критичної точки. З'ясовано, що технологія надкритичного циклу (S-CO_2) використовується майже для всіх існуючих джерел енергії, таких як сонячна, геотермальна, вичерпна енергія, атомні електростанції та системи рекуперації відпрацьованого тепла. Відомо, що оптимальне поєднання умов роботи та обладнання визначають максимальну ефективність енергоустановок. Ефективність компресору вирішальним чином впливає на цей показник. Але робочий процес компресора проходить поблизу критичної точки CO_2 , де теплофізичні властивості дуже чутливі до змін тиску та температури. Це значно ускладнює математичне моделювання процесу стискання і робить критично важливим достовірний опис параметрів стану робочого середовища. Розглянуто різноманітні рівняння стану реального газу, які здатні цілісно описати однофазні та паро-рідинні стани середовища. Основним недоліком досліджених рівнянь є значна похибка відносно результатів експериментів для S-CO_2 циклів, які реалізуються у безпосередній близькості до критичної точки CO_2 . Крім того, деякі з рівнянь стану реального газу мають велику кількість емпіричних коефіцієнтів, які є індивідуальними для кожного газу. Тому актуальною є науково-практична задача забезпечення моделювання

робочих процесів у енергетичному обладнанні, яке використовує двоокис вуглецю, в області навколо критичної точки робочого тіла, вибору та модифікації рівняння стану реального газу. Науково-практична задача була розділена на декілька етапів:

1. Аналіз результатів визначення термодинамічних параметрів на основі рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, порівняння з експериментальними значеннями. Модифікація оригінального рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є. Розробка програми для розрахунку термодинамічних параметрів CO_2 . Цей етап дозволяє відокремити похибку у визначенні параметрів за рівнянням стану від впливу на результат математичних моделей CFD (Computational Fluid Dynamics) вирішувача.

2. Реалізація модифікованого рівняння стану у програмному пакеті обчислювальної математики FEA AxCFD™.

Вирішення науково-практичної задачі виконувалася з відцентровим компресором циклу S- CO_2 , для якого є експериментальні результати, граничні умови та геометричні дані. Проточна частина відцентрового компресора була змодельована за допомогою програмних засобів 1D AxSTREAM® на основі серії звітів Sandia National Laboratories. Як робоче тіло був обраний CO_2 , властивості якого взяті з mini-NIST RefPROP - програми, яка використовує великі бази даних експериментальних вимірювань і складні рівняння стану). Рівняння Спана-Вагнера, яке використовується для визначення термодинамічних параметрів CO_2 має значний недолік при використанні його у 3D CFD моделюванні. Для подальшого розрахунку у програмному пакеті обчислювальної математики FEA AxCFD™ сформована модель робочого тіла, яке описується рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є. Це рівняння точно визначає властивості робочого тіла в надкритичній та газовій областях (менше 10% для тиску), але для областей рідкого та двофазного станів похибка для визначення тиску збільшується від 15% до 50%. У роботі представлено модифіковане рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, що дозволяє описати всю робочу область CO_2 . Розроблені масштабні поправки дозволили істотно знизити похибку при визначенні тиску в широкому діапазоні температур і питомих об'ємів. Рідинна область розглядалася у температурному діапазоні від 220 K до 300 K. Для

визначення тиску насиченої пари використовувався метод Лі-Кеслера. Порівняння експериментальних і розрахункових значень тиску показало їх добрий збіг. Для двофазної області розглядався температурний діапазон від 216,6 К до 304,12 К. Отриманий за методом Лі-Кеслера тиск насиченої пари використовувався при розв'язанні кубічного рівняння Редліха-Квонга-Анг'є для визначення питомого об'єму газової фази. Питомий об'єм рідкої фази визначався за емпіричним методом Ямади-Ганна. Порівняння об'ємів газової та рідкої фаз показало задовільний збіг з експериментальними даними. Безпосередньо для визначення тиску в критичній точці використано симбіоз масштабного рівняння та рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є із застосуванням класичної функції розподілу випадкових відхилень від середніх значень температури та густини.

Рівняння стану CO₂ було провалідовано з даними програми NIST RefPROP та з даними експерименту для робочого тіла CO₂. Максимальна похибка для тиску, отримана у програмі, становила менше 10%. Розрахунок властивостей CO₂ біля критичної точки є важливою задачею і точність цих розрахунків залежить від вибраної програми та рівняння стану. В різних програмах використовуються різні підходи та рівняння стану, що можуть впливати на точність розрахунків, особливо в умовах поблизу критичної точки CO₂.

1. NIST RefPROP/mini-NIST RefPROP є однією з найточніших програм для розрахунку термодинамічних властивостей CO₂. Вона використовує великі бази даних експериментальних вимірювань і складні рівняння стану, що дозволяє досягати високої точності, навіть біля критичної точки. Згідно з документацією NIST, для CO₂ похибки для тиску і температури, як правило, знаходяться в межах менше 1-2%. RefPROP враховує нелінійні корекції для реальних газів і включає параметри для фазових переходів і критичних точок, що дозволяє досягати високої точності у важких умовах (наприклад, при переході через критичну точку). Для визначення термодинамічних параметрів CO₂ програма RefPROP (NIST) використовує масштабне рівняння стану Спана-Вагнера. Рівняння складається з двох частин, які описують ідеально газову частину енергії Гелмгольца та залишкову частину енергії Гелмгольца. Рівняння має складну структуру, низку умов для опису

кожної з фаз CO_2 та велику кількість емпіричних коефіцієнтів (більше 100), що є значним недоліком для вирішення практичних задач.

2. CoolProp — це відкритий інструмент для розрахунку властивостей реальних газів. Для CO_2 він дає точність у межах 2-5% в більшості випадків, але точність може бути нижчою при розрахунках в окологритичних умовах. Це зумовлено використанням більш загальних рівнянь стану, ніж у RefPROP, які можуть бути менш точними в критичних умовах. Особливості: Хоча CoolProp має високий рівень точності для звичайних умов, похибки можуть зростати біля критичної точки, зокрема в межах змішаних фаз, через більш загальний підхід до розрахунків.

3. Програми Aspen Plus та HYSYS використовують рівняння стану Peng-Robinson (PR EOS) і Soave-Redlich-Kwong (SRK EOS), які забезпечують хорошу точність для більшості газів, але їх точність може бути значно гіршою при обчисленні властивостей CO_2 біля критичної точки. Для CO_2 похибка при використанні цих рівнянь стану може становити 5-10% в окологритичних умовах, оскільки ці моделі не завжди точно описують фазові переходи в таких умовах. Рівняння стану PR та SRK використовують спрощення, щоб скоротити обчислювальні витрати, але ці моделі можуть мати значні похибки в умовах поблизу критичних точок. Вони не завжди добре описують взаємодію молекул в умовах, де газ має змішану фазу (рідко-пара), що може призвести до більших похибок.

4. Програма ThermoFluid використовує рівняння стану, подібні до Soave-Redlich-Kwong або Peng-Robinson, і також може мати похибки біля критичної точки, які можуть досягати 5-10% при моделюванні властивостей CO_2 .

Таким чином, RefPROP (NIST) забезпечує найвищу точність для розрахунку властивостей CO_2 біля критичної точки, з похибками менше 1-2%. CoolProp має похибки 2-5%, що підходить для більшості практичних застосувань, хоча точність знижується біля критичних умов. Aspen Plus та HYSYS (Peng-Robinson і Soave-Redlich-Kwong) дають похибки до 5-10% при розрахунках біля критичної точки, що може бути непридатним для високоточних наукових розрахунків. Точність розрахунків залежить від конкретної програми і рівняння стану, а також від умов, у яких проводяться розрахунки, зокрема поблизу критичної точки CO_2 .

Визначення термодинамічних параметрів CO_2 біля критичної точки в CFD (Computational Fluid Dynamics) є складним завданням. У CFD програмах, таких як ANSYS Fluent, CFX або OpenFOAM, можливе вирішення задач з CO_2 поблизу критичної точки, але точність обмежена через флуктуації термодинамічних параметрів, таких як тиск, густина та температура.

Для моделювання фазових переходів у навколо критичних умовах необхідно застосовувати рівняння стану, які включають корекції для критичних властивостей, наприклад, корекції для різких змін тиску, густини чи інших термодинамічних величин. Модифіковане рівняння стану CO_2 , представлене у дисертаційній роботі, реалізує ці умови і було використано у програмному пакеті обчислювальної математики FEA AxCFD™ при моделюванні робочого процесу відцентрового компресора.

Відцентровий компресор з 1D AxSTREAM® було імпортовано у 3D AxCFD™ з метою подальшої валідації для кількох варіантів граничних умов: 1) в області двофазного стану CO_2 на вході до компресора та в області рідкого стану на виході з компресора; 2) в області рідкого стану CO_2 на вході до компресора та в області надкритичного стану на виході з компресора. Отримані значення коефіцієнта підвищення повного тиску та коефіцієнта корисної дії свідчать про те, що модифіковане рівняння стану можна використовувати для моделювання фазових переходів, а також у безпосередній близькості до критичної точки та оцінки роботи відцентрового компресора для програмних пакетів обчислювальної математики FEA у тривимірному просторі.

Визначено напрямки подальшого розвитку досліджень за допомогою розробленої математичної моделі та її вдосконалення.

Наукова новизна роботи:

У дисертації вперше одержані такі нові наукові результати:

1. Уперше розроблено масштабну поправку для рівняння Редліха-Квонга-Анг'є, що описує стан двоокису вуглецю як реального газу, яка дозволяє знизити похибку при розрахунку питомого об'єму рідкої фази в двофазній області відносно експериментальних даних з 6-25% до 0,5-1% для діапазону температур 220K-300K.

2. Уперше розроблено масштабну поправку для рівняння Редліха-Квонга-Анг'є, що описує стан двоокису вуглецю як реального газу, яка дозволяє знизити похибку при розрахунку докритичного тиску в області рідинного стану відносно експериментальних даних з 20–40% до 3–15% для діапазону температур 220–300 К.

3. На основі зазначених масштабних поправок суттєво вдосконалено математичну модель, яка описує термодинамічні параметри стану CO_2 в усьому діапазоні, включаючи двофазну та надкритичну області, використання якої суттєво підвищує точність чисельного моделювання термодинамічних процесів у відповідному енергетичному обладнанні.

Наукова та практична значущість результатів:

Розроблена математична модель адекватно описує властивості CO_2 в усіх станах цієї речовини, використовуючи при цьому мінімально необхідну кількість емпіричних коефіцієнтів у стандартному рівнянні стану Редліха-Квонга-Анг'є. Тому вона дозволяє визначати параметри робочого тіла та розраховувати робочі процеси обладнання, в якому використовується двоокис вуглецю, на будь-яких режимах його роботи.

Розроблена математична модель інтегрована до складу програмного пакету AxCFD™ для 3D CFD розрахунків лопаткових машин.

Отримані наукові результати можуть бути використані в науково-дослідних та проектних організаціях, конструкторських бюро, які виконують роботи з проектування та експериментального дослідження обладнання, робочим тілом якого є двоокис вуглецю.

Ключові слова: цикли S-CO_2 , рівняння стану реального газу, двофазний контур, що механічно перекачується, математичні моделі, теплопередача, системи управління, системи опалення, вентиляції та кондиціювання повітря, тиск, чисельне моделювання, багатофазні потоки, двофазний потік, потік рідини, критична точка, термогідрравлічні процеси, чисельне моделювання, моделювання, метод поправочних коефіцієнтів, контур, енергоефективність, тривимірне температурне поле, математичне моделювання, аналітичне рішення, моделювання робочого циклу, компресор, газорозподіл, газові суміші, надлишковий тиск.

Список публікацій здобувача:

1. Vorobiova, H., Dolmatov, D., Fesenko, K., Sysoiev, I., Dehtiarov, O., & Ivashchenko, M. (2024). Effect Detection Of Using A Modified Redlich-Kwongaungier Equation Of State On The Calculation Of Carbon Dioxide Flow In A Centrifugal Compressor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 128(8). <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.
2. Goldenberg, V., Conser, B., & Vorobyova, A. (2023, June). A Method of Pseudo-Steady State CFD Calculation to Predict Turbomachine Characteristics. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 87103, p. V13CT32A005). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/GT2023-101016>
3. Vorobieva H. S. (2021). Modification Of The Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State To Determine The Degree Of Dryness In The CO₂ Two-Phase Region. *Journal of mechanical engineering*, (24, № 4), 17-27. <https://doi.org/10.15407/pmach2021.04.017>.
4. Vorobieva H.S. (2022). Modification Of The Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State To Determine The Main Thermodynamic Parameters In The Pure Liquid CO₂ Region. *Journal of mechanical engineering*, 25(2), 6-13. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.02.006>
5. Vorobiova H. (2022). Modification Of Scaled Equation Of State To Determine The Pressure In The CO₂ Critical Region. *Technology audit and production reserves*, 3(1/65), 12-19. <https://doi.org/10.15587/2706-5448.2022.261858>.
6. Vorobiova H. (2023). Comparison Of Different Crossover Equations Of State For Determining The Pressure In The CO₂ Critical Region. *Moderní aspekty vědy: Xxvii. Díl mezinárodní kolektivní monografie / mezinárodní ekonomický institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní ekonomický institut s.r.o., Str UDC 001.32: 1/3] (477) (02)C91*
7. Воробйова, Г. С. (2024). Огляд і бібліометричне дослідження надкритичних енергетичних циклів CO₂. Поточний стан досліджень і розробок. *Авіційно-космічна техніка і технологія*, 2024, №3(195). <https://doi.org/10.32620/aktt.2024.3.07>.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

8. Vorobiova H. Crossover Equations of State to Determine the Pressure in the CO₂ Near-Critical Region, International Symposium on Advanced Materials and Application, ISSN : 1662-9752
9. Воробйова Г.С. Модифікація рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для застосування у широкому діапазоні роботи CO₂. Сучасні проблеми машинобудування - 2021, секція "Механіка".9, Тези доповідей конференції молодих вчених та спеціалістів. Друкується за рішенням Вченої ради Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України, протокол № 5 від 16.06.2021 р.
10. Vorobiova H., Fesenko K., Dehtiarov O. Implementation Of A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State For The Centrifugal Compressor Simulation In The Two-Phase CO₂ Region. Information technologies: science, engineering, technology, education, health : theses of the 32nd international scientific-practical conference MicroCAD–2024, [May 22-25, 2024] / ed. E. I. Sokol. – Kharkiv: NTU "KhPI", 2024. – P. 13. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>
11. Воробйова Г. С., Фесенко К. В., Дегтярьов О.Д. Моделювання одновимірних і тривимірних потоків рідкого вуглекислого газу в промисловому відцентровому компресорі. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доп. 32-ї міжнар. наук.-практ. конф. MicroCAD–2024, [22-25 травня 2024 р.] / ред. Є. І. Сокол. – Харків : НТУ "ХПІ", 2024. – Р. 24. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/80332>

ABSTRACT

Vorobiova H. S. Modification of the real gas equation of state for modelling of working processes in a centrifugal compressor near the critical point of CO₂. - Qualification scientific work on the rights of manuscript.

The thesis for a degree of Doctor of Philosophy (PhD) in specialty 142 Power Machinery (14 Electrical Engineering) - National Aerospace University "Kharkiv Aviation Institute", Kharkov, 2024.

The thesis is devoted to the urgent task of ensuring the analysis of working processes in energy equipment that uses carbon dioxide in the region around the critical point of the working fluid, the selection and modification of the equation of state of a real gas.

The paper analyzes the problems of modeling the processes of compression of CO₂ in a centrifugal compressor, which are carried out in close proximity to the critical point. It is found that the technology of the supercritical cycle (S-CO₂) is used for almost all existing energy sources, such as solar, geothermal, fossil energy, nuclear power plants and waste heat recovery systems. It is known that the optimal combination of operating conditions and equipment determine maximum efficiency power plants. The efficiency of the compressor has a decisive influence on this indicator. But the working process of the compressor takes place near the critical point of CO₂, where the thermophysical properties are very sensitive to changes in pressure and temperature. This significantly complicates the mathematical modeling of the compression process and makes a reliable description of the parameters of the state of the working medium critically important. Various equations of state of a real gas are considered, which are capable of comprehensively describing the single-phase and vapor-liquid states of the medium. The main drawback of the studied equations is a significant error relative to the results of experiments for S-CO₂ cycles, which are implemented in close proximity to the critical point of CO₂. In addition, some of the equations of state of a real gas have a large number of empirical coefficients that are individual for each gas. Therefore, the scientific and practical task of ensuring the modeling of working processes in energy equipment that uses carbon dioxide in the region around the critical point of the working medium, the selection and modification of the

equation of state of a real gas is relevant. The scientific and practical task was divided into several stages:

3. Analysis of results definition thermodynamic parameters based on Redlich-Kwong-Aungier equation of state, comparison with experimental values. Modification of the original Redlich-Kwong-Aungier equation of state. Development programs for calculating the thermodynamic parameters of CO₂. This stage allows you to separate the error in determining the parameters according to the equation of state from the influence on the result of the mathematical models of the CFD (Computational Fluid Dynamics) solver.

4. Implementation of the modified equation of state in the computational mathematics software package FEA AxCFD™.

Solution scientific and practical task was performed with a centrifugal compressor of the S-CO₂ cycle, for which contains experimental results, boundary conditions and geometric data. The flow part of the centrifugal compressor was modeled on using software tools 1D AxSTREAM® based on a series of reports from Sandia National Laboratories. CO₂ was chosen as the working fluid, the properties of which are taken from mini-NIST RefPROP - a program that uses large databases of experimental measurements and complex equations of state). Equations the Span-Wagner method, which is used to determine the thermodynamic parameters of CO₂, has a significant drawback when used in 3D CFD modeling. For further calculation, a model of the working fluid was created in the computational mathematics software package FEA AxCFD™, which is described by the Redlich-Kwong-Aungier equation of state. This equation accurately determines working fluid properties in supercritical and gas regions (less than 10% for pressure), but for regions of liquid and two-phase states the error for determining pressure increases from 15% to 50%. The paper presents a modified Redlich-Kwong-Aungier equation of state, which allows describing the entire working region of CO₂. The developed scale corrections allowed to significantly reduce the error in determining the pressure in a wide range of temperatures and specific volumes. The liquid region was considered in the temperature range from 220 K to 300 K. The Lee-Kesler method was used to determine the saturated vapor pressure. Comparison of experimental and calculated pressure values

showed their good agreement. For the two-phase region, the temperature range from 216.6 K to 304.12 K was considered. The saturated vapor pressure obtained by the Lee-Kesler method was used when solving the cubic Redlich-Kwong-Aungier equation to determine the specific volume of the gas phase. The specific volume of the liquid phase was determined by the empirical Yamada-Gann method. Comparison of the volumes of the gas and liquid phases showed a satisfactory agreement with the experimental data. Directly to determine the pressure at the critical point, a symbiosis of the scaling equation and the Redlich-Kwong-Aungier equation of state was used with the application of the classical distribution function of random deviations from the average values of temperature and density.

The CO₂ equation of state was validated with data from the NIST RefPROP program and with experimental data for the CO₂ working fluid. The maximum error for pressure obtained in the program was less than 10%. Calculating the properties of CO₂ near the critical point is an important task and the accuracy of these calculations depends on the selected program and equation of state. Different programs use different approaches and equations of state, which can affect the accuracy of the calculations, especially in conditions near the critical point of CO₂.

2. NIST RefPROP/mini-NIST RefPROP is one of the most accurate programs for calculating the thermodynamic properties of CO₂. It uses large databases of experimental measurements and complex equations of state, which allows to achieve high accuracy, even near the critical point. According to NIST documentation, for CO₂, the errors for pressure and temperature are usually within less than 1-2%. RefPROP takes into account nonlinear corrections for real gases and includes parameters for phase transitions and critical points, which allows to achieve high accuracy under difficult conditions (for example, when passing through the critical point). To determine the thermodynamic parameters of CO₂, the RefPROP program (NIST) uses the scaled Span-Wagner equation of state. The equation consists of two parts, which describe the ideal gas part of the Helmholtz energy and the residual part of the Helmholtz energy. The equation has a complex structure, a number of conditions for describing each of the phases of CO₂ and a

large number of empirical coefficients (more than 100), which is a significant drawback for solving practical problems.

2. CoolProp is an open source tool for calculating the properties of real gases. For CO₂, it provides an accuracy of 2-5% in most cases, but the accuracy may be lower when calculating near-critical conditions. This is due to the use of more general equations of state than RefPROP, which may be less accurate under critical conditions. Features: Although CoolProp has a high level of accuracy for normal conditions, the errors can increase near the critical point, particularly within mixed phases, due to the more general approach to calculations.

3. Aspen Plus and HYSYS use the Peng-Robinson (PR EOS) and Soave-Redlich-Kwong (SRK EOS) equations of state, which provide good accuracy for most gases, but their accuracy can be significantly worse when calculating the properties of CO₂ near the critical point. For CO₂, the error when using these equations of state can be 5-10% at near-critical conditions, because these models do not always accurately describe phase transitions at such conditions. The PR and SRK equations of state use simplifications to reduce computational costs, but these models can have significant errors at conditions near critical points. They do not always describe the interaction of molecules well in conditions where the gas has a mixed phase (liquid-vapor), which can lead to larger errors.

4. The ThermoFluid program uses equations of state similar to Soave-Redlich-Kwong or Peng-Robinson, and can also have errors near the critical point that can reach 5-10% when modeling CO₂ properties.

Thus, RefPROP (NIST) provides the highest accuracy for calculation properties of CO₂ near the critical point, with errors of less than 1-2%. CoolProp has errors of 2-5%, which is suitable for most practical applications, although the accuracy decreases near critical conditions. Aspen Plus and HYSYS (Peng-Robinson and Soave-Redlich-Kwong) give errors of up to 5-10% when calculating near the critical point, which may not be suitable for high-precision scientific calculations. The accuracy of the calculations depends on the specific program and equation of state, as well as on the conditions under which the calculations are performed, in particular near the critical point of CO₂.

Definition of thermodynamic CO₂ parameters near the critical point in CFD (Computational Fluid Dynamics) is a difficult task. In CFD programs such as ANSYS Fluent, CFX or OpenFOAM, it is possible solving problems with CO₂ near the critical point, but the accuracy is limited due to fluctuations in thermodynamic parameters such as pressure, density, and temperature.

To simulate phase transitions in around critical conditions, it is necessary to apply equations of state that include corrections for critical properties, for example, corrections for sudden changes in pressure, density, or other thermodynamic quantities. The modified equation of state for CO₂, presented in the dissertation, implements these conditions and was used in the computational mathematics software package FEA AxCFD™, when modeling the working process of a centrifugal compressor.

Centrifugal compressor with 1D AxSTREAM® was imported into 3D AxCFD™ for further validation for several boundary conditions: 1) in the region of the two-phase state of CO₂ at the compressor inlet and in the region of the liquid state at the compressor outlet; 2) in the region of the liquid state of CO₂ at the compressor inlet and in the region of the supercritical state at the compressor outlet. The obtained values of the total pressure increase coefficient and the efficiency coefficient indicate that the modified equation of state can be used to model phase transitions, as well as in the immediate vicinity of the critical point and to evaluate the operation of a centrifugal compressor for FEA computational mathematics software packages in three-dimensional space.

Directions for further research development using the developed mathematical model and its improvement are identified.

Scientific novelty of the work:

1. For the first time, a large-scale correction has been developed for the Redlich-Kwong-Aungier equation of state, which allows modeling the transition from the liquid to the supercritical state in the vicinity of the critical point of CO₂.

2. A mathematical model has been developed and implemented that comprehensively describes the thermal parameters of the CO₂ state in the range from two-phase to supercritical, the use of which increases accuracy in determining thermodynamic

parameters CO₂ unlike the NIST RefPROP program, the developed model has a small number of empirical coefficients.

Scientific and practical significance of the results:

The developed mathematical model adequately describes the properties of CO₂ in all states of this substance, using the minimum necessary number of empirical coefficients in the standard Redlich-Kwong-Aungier equation of state. Therefore, it allows determining the parameters of the working fluid and calculating the working processes of equipment using carbon dioxide in any operating modes.

The developed mathematical model is integrated into the AxCFD™ software package for 3D CFD calculations of bladed machines.

The obtained scientific results can be used in research and design organizations, design bureaus that carry out design and experimental research of equipment whose working fluid is carbon dioxide.

Keywords: S-CO₂ cycles, equation of state of a real gas, two-phase mechanically pumped loop, mathematical models, heat transfer, control systems, heating, ventilation, and air conditioning systems, pressure, numerical simulation, solution, multiphase streams, two-phase flow, liquid flow, critical point, thermo-hydraulic processes, numerical simulation, correction factor method, loop, energy efficiency, three-dimensional temperature field, mathematical modeling, analytical solution, operating cycle simulation, compressor, gas distribution, gas mixtures, excess pressure.

List of publications of the applicant:

1. Vorobiova, H., Dolmatov, D., Fesenko, K., Sysoiev, I., Dehtiarov, O., & Ivashchenko, M. (2024). Effect Detection Of Using A Modified Redlich-Kwongaungier Equation Of State On The Calculation Of Carbon Dioxide Flow In A Centrifugal Compressor. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, 128(8). <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.

2. Goldenberg, V., Conser, B., & Vorobyova, A. (2023, June). A Method of Pseudo-Steady State CFD Calculation to Predict Turbomachine Characteristics. In Turbo Expo:

Power for Land, Sea, and Air (Vol. 87103, p. V13CT32A005). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/GT2023-101016>

3. Vorobieva H.S. (2021). Modification Of The Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State To Determine The Degree Of Dryness In The CO₂ Two-Phase Region. Journal of mechanical engineering, (24, No. 4), 17-27. <https://doi.org/10.15407/pmach2021.04.017>.

4. Vorobieva H.S. (2022). Modification Of The Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State To Determine The Main Thermodynamic Parameters In The Pure Liquid CO₂ Region. Journal of mechanical engineering, 25(2), 6-13. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.02.006>

5. Vorobiova H. (2022). Modification of Scaled Equation of State to Determine the Pressure in the CO₂ Critical Region. Technology audit and production reserves, 3(1/65), 12-19. <https://doi.org/10.15587/2706-5448.2022.261858>.

6 . Vorobiova H. (2023). Comparison Of Different Crossover Equations Of State For Determining The Pressure In The CO₂ Critical Region. Modern Aspects Of Science: Xxvii. Part Of International Collective Monograph / International Economic Institute s.r.o.. Czech Republic: International Economic Institute s.r.o., Str UDC 001.32: 1/3] (477) (02)C91

7. Vorobyova, H. S. (2024). Review and bibliometric study of supercritical CO₂ energy cycles. Current state of research and development. Aerospace Engineering and Technology, 2024, No. 3(195). <https://doi.org/10.32620/aktt.2024.3.07>.

Scientific works that confirm the approval of the dissertation materials:

8. Vorobiova H. Crossover Equations of State to Determine the Pressure in the CO₂ Near-Critical Region, International Symposium on Advanced Materials and Application, ISSN : 1662-9752

10. Vorobiova H.S. Modification of the Redlich-Kwong-Angier equation of state for application in a wide range of CO₂ operation. Modern problems of mechanical engineering - 2021, section "Mechanics".9, Abstracts of reports of the conference of young scientists and specialists. Printed by decision of the Academic Council of the

Institute of Problems of Mechanical Engineering named after A. . M. Pidgorny NAS of Ukraine, protocol No. 5 dated 16.06.2021

11. Vorobiova H., Fesenko K., Dehtiarov O. Implementation Of A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State For The Centrifugal Compressor Simulation In The Two- Phase CO₂ Region. Information technologies: science, engineering, technology, education, health : theses of the 32nd international scientific-practical conference MicroCAD–2024, [May 22-25, 2024] / ed. E. I. Sokol. – Kharkiv: NTU "KhPI", 2024. – P. 13. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>

12. Vorobyova H. S., Fesenko K. V., Degtyarev O. .D. Modeling of one-dimensional and three-dimensional flows of liquid carbon dioxide in an industrial centrifugal compressor. Information technologies: science, engineering, technology, education, health: abstracts of the 32nd int. scientific-practical conference MicroCAD–2024, [May 22-25, 2024] / ed. E. I. Sokol. – Kharkiv: NTU "KhPI", 2024. – P. 24. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press /79693>

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	21
ВСТУП	24
РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ З МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРАКТИЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ КРИТИЧНИХ ТА НАДКРИТИЧНИХ ЦИКЛІВ CO ₂	37
1.1 Аналіз області застосування надкритичних циклів CO ₂ в енергетичному машинобудуванні	37
1.2 Аналіз рівнянь стану, які застосовуються для моделювання тривимірних потоків в умовах надкритичних циклів CO ₂	50
1.3 Висновки до першого розділу	53
1.4 Література до першого розділу	53
РОЗДІЛ 2 АНАЛІЗ ЦИКЛУ S-CO ₂ ТА МЕТОДИКИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ	62
2.1 Опис S-CO ₂ компресорного циклу	62
2.2 Вимірювальні прилади	68
2.3 Експериментальне дослідження стискання в компресорному циклі	72
2.4 Висновки до другого розділу	79
2.5 Література до другого розділу	80
РОЗДІЛ 3 1D/2D- ТА 3D- МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У ВІДЦЕНТРОВОМУ КОМПРЕСОРІ	81
3.1 1D/2D математичне моделювання процесів у відцентровому компресорі	81
3.2 3D математичне моделювання процесів у відцентровому компресорі	98
3.3 Висновки до третього розділу	115
3.4 Література до третього розділу	116
РОЗДІЛ 4 МОДИФІКАЦІЯ РІВНЯННЯ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ДЛЯ РОБОЧОЇ ОБЛАСТІ CO ₂	118
4.1 Визначення значення параметрів модифікованого рівняння стану Редліха- Квонга-Анг'є в окремих фазах робочого процесу	122
4.1.1 Математичне моделювання надкритичної та газової області робочого тіла	122
4.1.2 Математичне моделювання двофазної області робочого тіла	123
4.1.3 Математичне моделювання рідкої області робочого тіла	138
4.1.4 Математичне моделювання області навколо критичної точки робочого тіла	145
Метод 1. Визначення тиску з кросверного рівняння рівняння в навіолокритичній ділянці CO ₂ з регулярними та скейлінговими рівняннями.	146

1. Визначення тиску з регулярної частини кросоверного рівняння стану в навіколокритичній ділянці CO ₂	146
2. Визначення тиску із масштабової частини масштабного рівняння стану в навіколокритичній області CO ₂	147
Метод 2. Визначення тиску із масштабного рівняння стану в навіколокритичній області CO ₂	149
4.1.5 Лінія плавлення	156
4.2 Адаптація виразів розрахунку теплофізичних властивостей робочого тіла на основі прийнятої форми рівняння стану	157
Ентальпія	157
Ентропія	160
4.3 Висновки до четвертого розділу	163
4.4 Література до четвертого розділу	165
РОЗДІЛ 5 ВАЛІДАЦІЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ НА S-CO ₂ КОМПРЕСОРНОМУ ЦИКЛІ	169
Перевірка математичної моделі для рідкого CO ₂ на вході у компресор (296 К) ..	169
Перевірка математичної моделі для рідкого CO ₂ на вході у компресор (303 К) ..	175
5.1 Висновки до п'ятого розділу	178
5.2 Література до п'ятого розділу	179
РОЗДІЛ 6 МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК СТУПЕНЯ ВІДЦЕНТРОВОГО КОМПРЕСОРА З ВИКОРИСТАННЯМ МОДИФІКОВАНОГО РІВНЯННЯ СТАНУ	181
6.1 Математичне моделювання рідкої області CO ₂	181
6.2 Математичне моделювання двофазної області CO ₂	188
6.3 Висновки до шостого розділу	195
6.4 Література до шостого розділу	196
ВИСНОВКИ	197
ДОДАТОК А: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ДЛЯ ІЗОТЕРМ ГАЗОВОЇ ОБЛАСТІ	202
ДОДАТОК Б: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ НАДКРИТИЧНОЇ ОБЛАСТІ	208
ДОДАТОК В: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ РІДКОЇ ОБЛАСТІ	214

ДОДАТОК Г: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ	237
ДОДАТОК Д: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ЗНАЧЕНЬ ТИСКУ НАСИЧЕНИХ ПАР І ОТРИМАНИХ ЗА МЕТОДОМ ЛІ-КЕСЛЕРА В ДВОХФАЗНІЙ ОБЛАСТІ	238
ДОДАТОК Е: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ ОБЛАСТІ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ	239
РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ МЕТОДУ 2. ВИЗНАЧЕННЯ ТИСКУ ІЗ МАСШТАБОВОГО РІВНЯННЯ СТАНУ В ОБЛАСТІ CO ₂ ПОБЛИЗУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ	247
РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ МЕТОДУ 3. ВИЗНАЧЕННЯ ТИСКУ ІЗ МАСШТАБОВОГО РІВНЯННЯ СТАНУ В ОБЛАСТІ CO ₂ ПОБЛИЗУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ ІЗ МАСШТАБОВОЮ ГІПОТЕЗОЮ	254

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

- A_1 – площа на вході, м^2 ;
- c_1 – нахил ізохори в критичній точці, -;
- C_p – питома теплоємність, $\text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{K})$;
- $C_{s, \text{wake}}$ – меридіональна швидкість до перемішування (сліду), $\text{м}/\text{с}$;
- C_{s1} – меридіональна швидкість на вході, $\text{м}/\text{с}$;
- C_{s2} – меридіональна швидкість на виході, $\text{м}/\text{с}$;
- C_{u1} – тангенціальна складова абсолютної швидкості на вході, $\text{м}/\text{с}$;
- C_{u2} – тангенціальна складова абсолютної швидкості на виході, $\text{м}/\text{с}$;
- d_h – гідравлічний діаметр, м ;
- d_{H1} – гідравлічний діаметр на вході, м ;
- d_{H2} – гідравлічний діаметр на виході, м ;
- D_0 – критична ізотерма, -;
- D_{1m} – середній діаметр на вході, м ;
- D_2 – діаметр на виході, м ;
- D_{2m} – середній діаметр на виході, м ;
- De_{qx} – еквівалентний коефіцієнт дифузії, -;
- f_c – поправочний коефіцієнт, -;
- g – прискорення вільного падіння, $\text{м}/\text{с}^2$;
- $H_0(T)$ – ідеально-газова ентальпія при заданій температурі, $\text{Дж}/\text{кг}$;
- is_{in} – статична ентальпія на вході у компресор, $\text{Дж}/\text{кг}$;
- K_1 – геометричний кут на вході, град.;
- K_2 – геометричний кут на виході, град.;
- L_b – середня довжина вигину лопатки, м ;
- lc_1 – ширина входу в канал, м ;
- om – загальний коефіцієнт витрат тиску, -;
- P_{rel_in} – повний відносний тиск на вході, Па ;
- P_{rel_out} – загальний відносний тиск на виході, Па ;
- P_{rels_out} – повний відносний тиск на виході, Па ;

p_{s_in} – статичний тиск на вході у компресор, Па;
 p_{s_in} – статичний тиск на вході, Па;
 Ψ – коефіцієнт роботи, -;
 p_{tr} – тиск у потрібній точці, Па;
 R – універсальна газова стала, Дж/(моль·К);
 r' – середній радіус, м;
 r_1 – радіус на вході (в і-подібному перерізі), м;
 r_2 – радіус на виході;
 ρ – густина, кг/м³;
 S – CO₂ – Supercritical CO₂ – надкритичний окис вуглецю;
 S – ентропія, Дж/(кг·К);
 $S^0(T, P^0)$ – ідеально-газова ентропія при заданій температурі, Дж/(кг·К);
 $S^0(T^0, P^0)$ – референсне значення ентропії, Дж/(кг·К);
 T – поточне значення температури, К;
 T_{cr} – критична температура речовин, К;
 T_{rel_in} – загальна відносна температура на вході, К;
 T_{rel_out} – загальна відносна температура на виході, К;
 t_{s_in} – статична температура на вході у компресор, К;
 T_{tr} – температура в потрібній точці, К;
 U_2 – колова швидкість, м/с;
 V – об'єм робочого тіла, м³/кг;
 V_{cr} – критичний питомий об'єм речовини, м³/кг;
 V_n – швидкість по нормалі до поверхні, м/с;
 W' – середня відносна швидкість, м/с;
 W – відносна швидкість, м/с;
 W_{u2} – відносна тангенціальна швидкість на виході, м/с;
 ω – коефіцієнт ацентричності, -;
 $\alpha(T)$ – температурний коефіцієнт у рівнянні стану Редліха-Квонга-Анг'є;
 ΓU – граничні умови;
 $H_0(T)_0$ – референсне значення ентальпії, Дж/К;

P_{cr} – критичний тиск речовин, Па;

P_C – рівняння стану, Па;

C_1 - C_5 – поліноміальні коефіцієнти, -;

z – загальна кількість лопаток (повна лопатка + спліттер), -;

z_b – кількість повних лопаток, -;

λ – коефіцієнт викривлення лопатки робочого колеса, -.

ВСТУП

Актуальність досліджень. Цикли, в яких використовується діоксид вуглецю в надкритичному стані – надкритичні цикли CO_2 (S- CO_2) – знайшли застосування в енергетичному машинобудуванні; завдяки ним можна отримати високу ефективність у широкому діапазоні температури та тиску. Термодинамічні цикли S- CO_2 можуть бути як прямими (більш поширені), так і зворотними, залежно від конкретної конфігурації системи. В обох випадках окремі процеси в циклах проходять через області, в яких робоче тіло знаходиться в рідкому та двофазному станах наближених до критичної точки [1].

Використання надкритичних циклів CO_2 – це ефективний напрямок технологій виробництва електроенергії [2], включаючи використання викопного палива, сонячної та морської енергії, біомаси та ядерної енергії. Команда під керівництвом Інституту газових технологій (GTI), Південно-Західного дослідницького інституту (SwRI) та General Electric Global Research (GE) ініціювала проектування, будівництво, введення в експлуатацію універсальної та реконфігурованої установки надкритичного двоокису вуглецю. проект під назвою STEP Demo (Supercritical Transformational Electric Power) є одним із наймасштабніших і найкомплексніших у світі. Його ключовим елементом є забезпечення сучасної продуктивності силового циклу S- CO_2 за високих температур: від підтвердження концепції до прототипу системи.

S- CO_2 цикли найбільш ефективні біля критичної точки CO_2 з кількох причин:

- біля критичної точки CO_2 має високу густину та відносно низьку в'язкість. Це дозволяє значно покращити теплопередачу, оскільки густіша рідина здатна краще переносити теплоту, а низька в'язкість зменшує енергетичні витрати на прокачку.

- підвищення температури та тиску наближає CO_2 до умов, коли його властивості оптимальні для ефективного виконання теплових циклів. Вищі температури та тиски збільшують енергетичну ефективність, дозволяючи генерувати більше корисної роботи при тих самих енергетичних витратах.

Обов'язковим для опису процесу у розрахункових програмах є використання рівняння стану реального газу. Найбільшою складністю є опис зміни температури та густини в фазових переходах та в області біля критичної точки. У статті [3] представлено результати моделювання робочого процесу відцентрового компресора S-CO₂. Для опису області біля критичної точки можна застосувати рівняння Редліха-Квонга (RK) [4], Редліха-Квонга-Анг'є (RKA) [5], Соаве-Редліха-Квонга(RKS) [6] або Пенга-Робінсона (PR) [7]. На рис. 1 зображений розподіл ізотерм із експериментальних даних та ізотерм, які отримані за допомогою рівнянь PR, RK та RKS. Хоча більшість рівнянь стану здатні охопити важливі теплофізичні варіації, обчислювальна здатність відіграє значну роль у виборі відповідного рівняння. Для чисельної ефективності рівняння стану мають бути достатньо простими, щоб дозволити швидке обчислення термодинамічних параметрів робочого тіла, одночасно враховуючи всю складність нелінійного зв'язку між змінними.

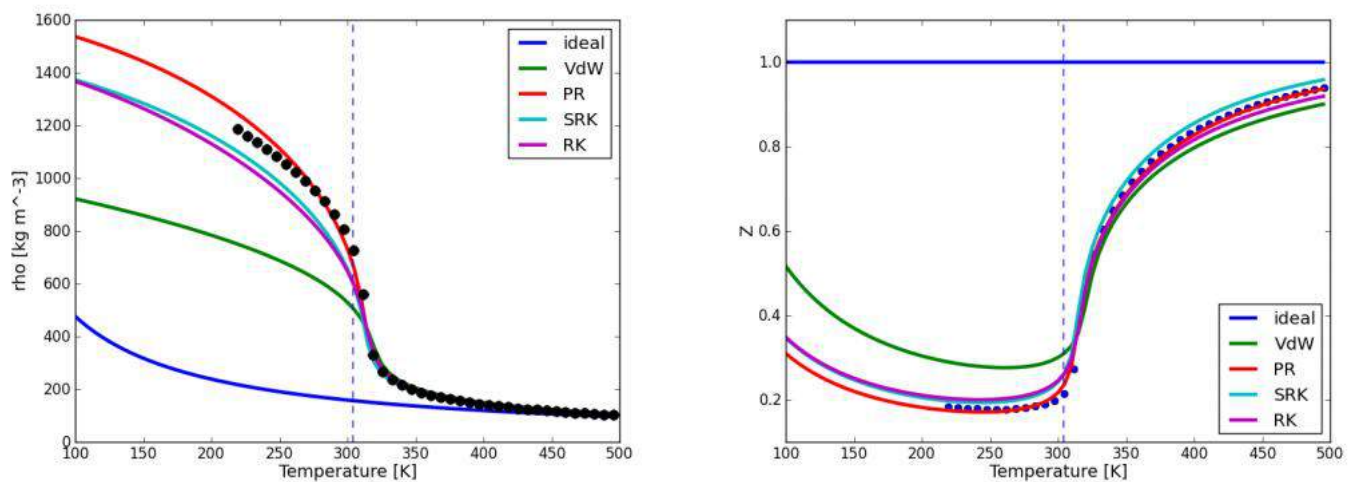


Рис. 1. Розподіл густини відносно температури та розподіл коефіцієнта стискаємості відносно температури. Порівняння різних рівнянь стану з даними з NIST RefPROP

На основі наявних даних було проведено порівняння рівнянь стану для різних областей (рис. 2): області газу, області рідкого CO₂, надкритичної області та двофазної області. Кожне рівняння стану показало подібну поведінку пари у двофазній області та газу у газовій області, навіть якщо відносне відхилення в останній області було трохи вищим. RKS та його модифікації демонстрували

однакову поведінку та мали тенденцію до відхилення від експериментальних значень в сторону заниження, тоді як PR та його модифікації, модель Бенедикта-Вебба-Рубина-Старлінга (BWRS) [8] та Ли-Кеслера-Пльокера (LK) [9] мали тенденцію до відхилення від експериментальних значень в сторону збільшення.

Порівняння результатів, які отримані для кожного рівняння стану, проводилося за значенням максимальної величини відносної похибки:

$$RD\rho = \frac{\rho_{calc} - \rho_{exp}}{\rho_{exp}};$$

$$MAXD\rho = \max |RD\rho|.$$

Модель Span-Wagner, яка використовується у REFPROP мала хорошу точність прогнозування густини; відносне відхилення було менше 0,5% в області пари і 1,2% в області газу. Найгіршими були результати густини по рівнянню PR та його модифікації, крім рівняння Пенга-Робінсона з Бостон Матіас екстраполяцією (PR-BM) [10], RKS та його модифікації, крім рівнянь Соаве-Редліха-Квонга-Пенелю (RKSP) [11] та Соаве-Редліх-Квонг-Пенелю з альфа функцією (RKSP-TWU) [12], які мали похибки вище 10%, зокрема поблизу критичної температури, де вони досягли навіть 25%. Рівняння PR-BM, RKSP і RKSP-TWU краще збігаються з експериментальними даними, фактично їх точність становить близько 3,5% для газової області. Рівняння LK і REFPROP модель мала найменше відносне відхилення (<1,5% для першої та <0,5% для другої) для рідкої області. Навпаки, найгірший прогноз густини в надкритичній області був отриманий рівняннями RKSP і RKSP-TWU, тоді як PR і його модифікації краще передбачили експериментальні дані (точність < 3,8%). Знову рівняння LK і модель REFPROP показали найменше відносне відхилення. PR, PR-MC, PR-TWU, RKS, RKS-TWU і REFPROP дуже добре відповідали експериментальним даним щодо густини насиченої рідини: максимальне відхилення становило 0,09% для останнього та 0,9% для інших. LK показав низьке відхилення (точність < 1,6%), за винятком кількох даних. PR-BM, RKSM, RKSP, RKSP-TWU і BWRS, зокрема поблизу критичної точки, прогнозували густину з меншою точністю. Зміщення, AAD і максимальне відхилення кожного рівняння стану відображені на рис. 2, і очевидно, що модель

REFPROP, де рівняння Span-Wagner для CO₂ реалізовано, добре передбачив експериментальні дані в кожному аналізованому регіоні.

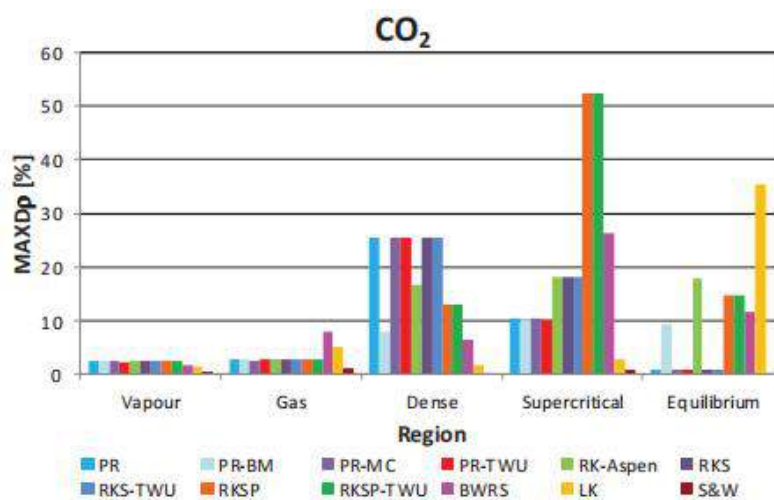


Рис. 2 Порівняння максимальної відносної похибки густини у всіх фазах CO₂ для різних рівнянь стану

Модель ARK є подальшою модифікацією рівняння RK, у якій параметри і зроблені як функції температури, фактора центричності рідини та критичного питомого об'єму. Він більш точний, особливо поблизу критичної точки, а також для рідин з негативним ацентричним фактором. Модель Анг'є потребує додаткові два параметри більше, ніж модель Редліха-Квонга, але було показано, що вона досягає зменшення середньоквадратичного рівня помилки приблизно на 50%. На Рисунку 3 показані похибки прогнозованого тиску, отриманих у результаті розв'язання рівняння стану, модифікованого Анг'є. Рівняння дає хорошу точність, а модифікація Анг'є показує значне покращення. Результати по точності включають точки для високих значень тиску для кожної температури і розглядається для всіх фаз.

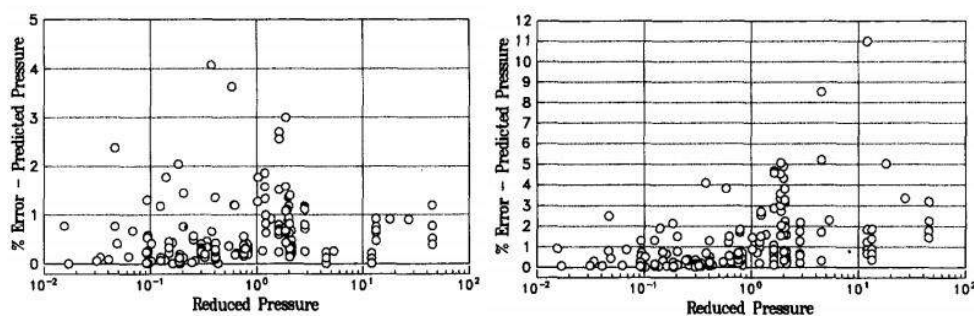


Рис. 3 Відносна похибка тиску для моделі Редліха-Квонга-Анг'є та моделі Соаве-Редліха-Квонга

Серед перерахованих рівнянь стану модель Редліха-Квонга-Анг'є таке ж просте по формі, як і оригінальне рівняння та має лише два додаткових коефіцієнта, що робить його дуже привабливим для використання в програмах аналізу динаміки рідини, де швидкість обчислення є критично важливою з помірними витратами на комп'ютерні ресурси. Рівняння Редліха-Квонга-Анг'є відображає складніші взаємодії молекул у газах, зокрема при переходах через критичну точку, даючи більш точні значення при визначенні таких властивостей, як температура, об'єм і тиск.

Альтернативним варіантом є імпорт моделі реального газу з використанням кросплатформної інтеграції кількох розрахункових пакетів високого рівня. З такою метою, наприклад, використовуються NIST RefPROP або CoolPROP, проте в області критичної точки результати залишаються незадовільними. Незважаючи на те, що рівняння Спана-Вагнера добре описує поведінку газу в багатьох умовах, його точність біля критичної точки може знижуватись через обмежену здатність точно моделювати фазовий перехід (газ-рідина). Біля критичної точки газ і рідина стають недиференційованими, і точність опису переходу між фазами може бути недостатньою.

Значна похибка у моделюванні поведінки CO_2 у околицях критичної точки показує необхідність модифікації рівняння стану. Таким чином, моделювання фазових переходів, опису реального газу в рідкому стані та в околиці критичної точки є актуальною задачею. Один із підходів до її розв'язання пропонується в дисертаційній роботі.

Здійснити в холодильній установці підведення і відведення теплоти по ізотермах вдається в тому випадку, якщо як холодоагент використовується волога пара будь-якого легкокиплячого робочого тіла, тобто рідини, у якої температура кипіння при атмосферному тиску менше температури навколишнього середовища [13]. Для розрахунку режимів роботи холодильного та теплового обладнання та моделювання циклів у програмах необхідно забезпечити точне прогнозування термодинамічних властивостей потоку робочого тіла у всіх компонентах установок. Оскільки вхідні

властивості компресора циклу S-CO₂ знаходяться у області навколо критичної точки, невеликі зміни вхідних властивостей компресора можуть суттєво вплинути на термодинамічні властивості потоку у компресорі та у наступних компонентах холодильної установки. Це, у свою чергу, може вплинути на процес стиснення, що може знизити ефективність системи, а також запас помпажа компресора, що має вирішальне значення для експлуатаційної безпеки системи [14]. Таким чином, для підтримки надійної та ефективної роботи компресора потрібен точний розрахунок термодинамічних параметрів потоку у компресорі циклу S-CO₂ [15]. Прийнятною точністю для порівняння між результатами розрахунку та експериментальними даними було обрано 5% для термодинамічних властивостей потоку у компресорі.

Дослідницьки команди SwRI: Southwest Research Institute, USA; Thar: Thar Energy LLC; KAPL: Knolls Atomic Power Lab; Aramco: Aramco Services Co.; EPRI: Electric Power Research Institute, USA; GE: General Electric Company; BAPL: Bettis Atomic Power Laboratory; KIER: Korea Institute of Energy Research; KAIST: Korea Advanced Institute of Science and Technology; POSTECH: Pohang University of Science and Technology; TIT: Tokyo Institute of Technology підсумували дослідницьку роботу з S-CO₂ циклами наступним чином:

1. Було досягнуто успішної демонстрації циклів S-CO₂, більшість з них для малогабаритних радіальних турбомашин.
2. Малогабаритні випробувальні контури мають нижчу ефективність, іноді вихідні параметри нижче проектних значень.
3. Витік CO₂ через системи ущільнення серйозний і погіршує ефективність системи.

Разом з прагненням до підвищення ефективності циклу, покращення економічних показників та більшого розповсюдження у енергетичній галузі, виділяються такі недоліки, які заважають комерційному та широкому застосуванню циклів S-CO₂:

- (1) Відсутня методологія проектування та аналізу систем для циклів S-CO₂, з різними джерелами тепла, з урахуванням проектних/непроектних умов та перехідних режимів.

(2) Механізми теплопередачі та перетворення тепла у циклах S-CO₂ не повністю вивчені, що перешкоджає точному проектуванню та оцінці ключових компонентів.

(3) Існують різні технічні недоліки технології виготовлення, систем ущільнення, та стабільності для турбомашин [16].

Метою даної роботи є розробка та застосування у програмному пакеті обчислювальної математики FEA CFD модифікованого рівняння стану, яке може описати весь робочий діапазон CO₂, включаючи двофазну та надкритичну області з прийнятною для розрахунків похибкою (2-5% для двофазної та рідкої області).

Актуальною проблемою є моделювання процесів у енергоустановках, коли робоче тіло знаходиться в безпосередній близькості до критичної точки. Проте поблизу критичної точки теплофізичні властивості CO₂ дуже чутливі до змін тиску та температури. У попередніх дослідженнях розглянуто різноманітні методи, які здатні визначити параметри у двофазній області. Основним недоліком цих досліджених рівнянь є значна похибка для розрахунків молярного об'єму у рідкій та двофазній областях (більше 10%) відносно результатів експериментів для CO₂, особливо у безпосередній близькості до критичної точки CO₂.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі **задачі**:

- Моделювання течії у відцентровому компресорі з визначенням меж використання конкретних рівнянь стану та точності прогнозування питомого об'єму, тиску, ентальпії та ентропії CO₂ в області критичної точки та у переходах між фазами.
- Вибір базового рівняння стану реального газу та його модернізація на основі співставлення з наявними експериментальними даними та результатами використання для розрахунку відцентрового компресора.
- Вибір масштабного рівняння стану згідно з флуктуаційною теорією фазових переходів для опису поведінки тиску та молярного об'єму CO₂ в околицях критичної точки.
- Впровадження модернізованого рівняння стану реального газу для моделювання робочого процесу компресора в програмному пакеті обчислювальної математики FEA AxCFDTM без обмежень діапазона параметрів стану CO₂ з

прийнятною для розрахунків похибкою визначення параметрів (2-5% для двофазної та рідкої області)

Об'єктом дослідження є термодинамічні процеси стиснення двоокису вуглецю, які реалізуються в околиці критичної точки.

Предметом дослідження є залежності між термічними параметрами двоокису вуглецю в областях рідкого та двофазного станів у околиці критичної точки.

Наукова новизна:

4. Розроблено масштабну поправку для рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, яка дозволяє знизити похибку у визначенні питомого об'єму рідкої фази у двофазній області з 6-25% до 0,5-1% для діапазону температур 220К-300К відносно експериментальних даних.

5. Розроблено масштабну поправку для рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, яка дозволяє знизити похибку у визначенні докритичного тиску у області рідинних станів з 20-40% до 3-15% відносно експериментальних даних для діапазону температур 220К - 300К.

6. Розроблено та реалізовано математичну модель, яка описує термічні параметри стану CO_2 в усьому діапазоні, включаючи двофазну та надкритичну області, використання якої суттєво підвищує точність моделювання термодинамічних процесів у відповідному обладнанні.

Наукова та практична значущість результатів

Розроблена математична модель адекватно описує властивості CO_2 в усіх станах цієї речовини, використовуючи при цьому мінімально необхідну кількість емпіричних коефіцієнтів у стандартному рівнянні стану Редліха-Квонга-Анг'є. Тому вона дозволяє визначати параметри робочого тіла та розраховувати робочі процеси обладнання, в якому використовується діоксид вуглецю, в будь-яких умовах його роботи.

Розроблена математична модель інтегрована до складу програмного пакету AxCFD™ для 3D CFD розрахунків лопаткових машин.

Отримані наукові результати можуть бути використані в науково-дослідних та проектних організаціях, конструкторських бюро, які виконують роботи з

проектування та експериментального дослідження обладнання, робочим тілом якого є діоксид вуглецю.

Ступінь достовірності результатів базується на валідації результатів тривимірного розрахунку в програмному пакеті обчислювальної математики FEA 3D AxCFD™ з результатами серії експериментів, отриманими для відцентрового компресора циклу S-CO₂. Також розроблене модифіковане рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є було порівняно з рівнянням стану Спана-Вагнера, яке є базовим рівнянням моделювання CO₂ для програми mini-NIST RefPROP та має найвищу серед наявних методів збіжність з експериментальними даними в усьому діапазоні роботи обладнання, робочим тілом якого є CO₂. Похибка у визначенні питомого об'єму рідкої фази у двофазній області з 6-25% до 0,5-1% для діапазону температур 220K-300K; похибка у визначенні докритичного тиску у області рідинних станів з 20-40% до 3-15% у порівнянні з експериментальними даними для діапазону температур 220K - 300K.

Практичне використання роботи

Роботу введено в код програмного пакету обчислювальної математики FEA AxCFD™ (SoftInWay inc), який використовується для проектування енергетичного обладнання.

Особистий внесок здобувачки. Наукові положення і результати, викладені в дисертаційній роботі та винесені на захист, отримано особисто здобувачкою. Авторка виконала аналіз існуючих методів моделювання параметрів термодинамічних властивостей реальних газів, брала безпосередню участь у розробці математичних моделей і алгоритмів розрахунків. Вона самостійно виконувала реалізацію математичної моделі в коді програмного пакету обчислювальної математики FEA AxCFD™, її апробацію та валідацію з результатами серії експериментів, отриманих для відцентрового компресора, що працює в циклі S-CO₂.

Публікації. Основний зміст дисертації відображено в 4 статтях, опублікованих в журналах, які входять до переліку наукових фахових видань України [3, 17, 18, 21], у 2 статтях у виданнях, що реферуються в наукометричній базі Scopus [1, 2].

Окрім цього, основні результати роботи опубліковано в 4 тезах доповідей конференцій [22-25] та в одній колективній монографії [19].

Усі положення наукової новизни дисертації отримано авторкою самостійно. У статтях, що опубліковані в співавторстві: проведення досліджень і аналіз результатів виконані авторкою особисто; формулювання задач і висновків виконано разом з науковим керівником і частково зі співавторами публікацій; підготовку й видання науково-технічних статей виконано за участю співавторів. У спільних роботах авторці належить:

[1] - Моделювання тривимірних потоків рідкого вуглекислого газу в промисловому відцентровому компресорі із застосуванням модифікованого авторкою рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є. Впровадження математичної моделі у код програмного пакету обчислювальної математики FEA AxCFD™, її апробація та валідація з результатами серії експериментів, отриманими для відцентрового компресора у циклі S-CO₂.

[2] - Розробка методу моделювання робочих характеристик турбомашини для забезпечення гладкого сполучення різних робочих точок без необхідності моделювати ці точки окремо.

Подяки

Авторка висловлює подяку колективу Національного аерокосмічного університету "ХАІ" за неоціненну допомогу в написанні дисертації. Також авторка висловлює подяку колективу SoftInWay inc. за надання доступу до коду програми AxCFD™ і консультації.

Обсяг та структура роботи

Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновків і списків використаних джерел до кожного розділу, та загальних висновків. Загальний обсяг дисертації становить 257 сторінок, з них 205 сторінки основного тексту, 146 рисунка по тексту, 13 таблиць по тексту, списки використаних джерел до кожного розділу, сумарно викладені на 18 сторінках, та 6 додатків на 50 сторінках.

Література до вступу

- [1] Vorobiova, H., Dolmatov, D., Fesenko, K., Sysoiev, I., Dehtiarov, O., & Ivashchenko, M. (2024). Effect Detection Of Using A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State On The Calculation Of Carbon Dioxide Flow In A Centrifugal Compressor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 128(8). <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>
- [2] Goldenberg, V., Conser, B., & Vorobyova, A. (2023, June). A Method of Pseudo-Steady State CFD Calculation to Predict Turbomachine Characteristics. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 87103, p. V13CT32A005). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/GT2023-101016>
- [3] Vorobieva, H. S. (2021). Modification of the Redlich-Kwong-Aungier equation of state to determine the degree of dryness in the CO₂ two-phase region. *Journal of mechanical engineering*, (24, № 4), 17-27. <https://doi.org/10.15407/pmach2021.04.017>.
- [4] Redlich, O., & Kwong, J. N. (1949). On The Thermodynamics Of Solutions. V. An Equation Of State. Fugacities Of Gaseous Solutions. *Chemical reviews*, 44(1), 233-244.
- [5] Aungier, R. H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation Of State For Fluid Dynamic Analysis Applications. *Journal of Fluids Engineering*, 117(2), 277–281. <https://doi.org/10.1115/1.2817141>
- [6] Soave, G. (1972). Equilibrium Constants From A Modified Redlich-Kwong Equation Of State. *Chemical engineering science*, 27(6), 1197-1203.
- [7] Robinson, D. B., Peng, D.-Y., & Ng, H.-J. (1977). Applications Of The Peng-Robinson Equation Of State. *ACS Symposium Series*, 200–220. <https://doi.org/10.1021/bk-1977-0060.ch008>
- [8] McFee, D. G., Mueller, K. H., & Lielmezs, J. (1982). Comparison of Benedict—Webb—Rubin, Starling and Lee—Kesler equations of state for use in P—V—T calculations. *Thermochimica Acta*, 54(1-2), 9-25.
- [9] Fischer, S. K., & Sand, J. R. (1990). Thermodynamic calculations for mixtures of environmentally safe refrigerants using the Lee-Kesler-Ploecker equation of state (No. CONF-900742-2). Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States).

- [10] Long, R. W., Hildebrand, J. H., & Morrell, W. E. (2008). Peng-Robinson Alpha Functions. Aspen Physical Property System, 72.
- [11] Péneloux, A., Rauzy, E., & Fréze, R. (1982). A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes. *Fluid phase equilibria*, 8(1), 7-23.
- [12] Privat, R., Visconte, M., Zazoua-Khames, A., Jaubert, J. N., & Gani, R. (2015). Analysis and prediction of the alpha-function parameters used in cubic equations of state. *Chemical Engineering Science*, 126, 584-603.
- [13] Кириллин, В., Сычев, В., & Шейндлин, А. (1968). *Техническая термодинамика*. Рипол Классик.
- [14] Jeong, Y. (2023). Development of correction method considering real gas effect for S-CO₂ compressor performance evaluation and operating limits.
- [15] Kim, G., Lee, S., Son, I. W., & Lee, J. I. (2024). Optimal controller for S-CO₂ compressor inlet conditioning. *Case Studies in Thermal Engineering*, 59, 104528. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2024.104528>
- [16] Xu, J., Liu, C., Sun, E., Xie, J., Li, M., Yang, Y., & Liu, J. (2019). Perspective of S-CO₂ power cycles. *Energy*, 186, 115831. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.07.161>
- [17] Vorobiova, H. (2022). Modification of the Redlich-Kwong-Aungier Equation of State to Determine the Main Thermodynamic Parameters in the Pure Liquid CO₂ Region. *Journal of mechanical engineering*, 25(2), 6-13. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.02.006>
- [18] Vorobiova, H. (2022). Modification of scaled equation of state to determine the pressure in the CO₂ critical region. *Technology audit and production reserves*, 3(1/65), 12-19. <https://doi.org/10.15587/2706-5448.2022.261858>.
- [19] Vorobiova H. (2023). Comparison Of Different Crossover Equations Of State For Determining The Pressure In The CO₂ Critical Region. *Moderní aspekty vědy: Xxvii. Díl mezinárodní kolektivní monografie / mezinárodní ekonomický institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní ekonomický institut s.r.o. UDC 001.32: 1/3] (477) (02)C91*

- [20] Воробйова, Г. С. (2024). Огляд і бібліометричне дослідження надкритичних енергетичних циклів CO₂. Поточний стан досліджень і розробок. <https://doi.org/10.32620/aktt.2024.3.07>.
- [21] Vorobiova, H. (2023). Application Of The Scaling Theory To Determine The Pressure In The Near-Critical CO₂ Region. Сучасні Аспекти Модернізації Науки: Стан, Проблеми, Тенденції Розвитку, 337.
- [22] Vorobiova H. (2023). Crossover Equations of State to Determine the Pressure in the CO₂ Near-Critical Region «International Symposium on Advanced Materials and Application» ISSN : 1662-9752
- [23] Воробйова Г.С. (2021). Модифікація рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для застосування у широкому діапазоні роботи CO₂. Сучасні проблеми машинобудування, секція "Механіка".9, Тези доповідей конференції молодих вчених та спеціалістів. Друкується за рішенням Вченої ради Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України, протокол № 5 від 16.06.2021 р.
- [24] Vorobiova H., Fesenko K., Dehtiarov O. (2024). Implementation Of A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State For The Centrifugal Compressor Simulation In The Two-Phase CO₂ Region. Information technologies: science, engineering, technology, education, health: MicroCAD–2024, P. 13. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>
- [25] Воробйова Г. С., Фесенко К. В., Дегтярьов О.Д. (2024). Моделювання одновимірних і тривимірних потоків рідкого вуглекислого газу в промисловому відцентровому компресорі. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доп. 32-ї міжнар. наук.-практ. конф. MicroCAD–2024, [22-25 травня 2024 р.] / ред. Є. І. Сокол. – Харків : НТУ "ХПІ", 2024. – Р. 24. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>

РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ З МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРАКТИЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ КРИТИЧНИХ ТА НАДКРИТИЧНИХ ЦИКЛІВ CO₂

Робота висвітлює галузь надкритичних циклів CO₂ (S-CO₂), які знайшли застосування в енергетичному машинобудуванні, завдяки яким можна отримати високу ефективність у широкому діапазоні температури та тиску. Крім того, цикли S-CO₂ мають можливість функціонувати з високою ефективністю в діапазоні навколо критичної точки. Деякі цикли можуть проходити в рідкій та двофазній областях, максимально наближених до критичної точки [1].

В околі критичної точки в газовому середовищі може відбуватися конденсація, а в рідкому – кавітація. Краплі конденсату на робочому колесі погіршують продуктивність компресора або спричинити ерозію. Кавітація генерує велику кількість бульбашок, які займають більшу частину каналу, що призводить до блокування. Крім того, температура та тиск рідини S-CO₂ можуть опуститися нижче критичної точки та пройти через лінію насичення, що спричинить зміну фази під час запуску-зупинки компресора та непроекtnих налаштувань. Урахування зазначених ефектів є однією з основною проблем під час моделювання течії в компресорі в тривимірному просторі, причому найбільш складно описати коливання температури та густини в фазових переходах та в області біля критичної точки. Комерційні програмні пакети зазвичай використовують стандартні моделі, які дають незадовільні результати під час розрахунків течії із фазовими переходами. Альтернативним варіантом є імпорт моделі реального газу з використанням кросплатформної інтеграції кількох розрахункових пакетів високого рівня, таких як NIST RefPROP або CoolPROP, проте в області критичної точки результати залишаються незадовільними. Таким чином, моделювання фазових переходів, опис стану реального газу в рідкій фазі в околі критичної точки з прийнятою точністю є актуальною задачею.

Таким чином, огляд літературних джерел доречно виконати в такій послідовності:

- проаналізувати області застосування надкритичних циклів CO₂ в енергетичному машинобудуванні;
- проаналізувати рівняння стану, які застосовуються для моделювання тривимірного потоку в надкритичних циклах CO₂.

1.1 Аналіз області застосування надкритичних циклів CO₂ в енергетичному машинобудуванні

Надкритичні цикли CO₂ – це напрям розвитку технологій виробництва електроенергії [2], який використовується в ряді енергетичних програм, включаючи енергію викопного палива, тепла, сонячної і морської енергії, біомаси та ядерної енергії. Команда під керівництвом Інституту газових технологій (GTI), Південно-Західного дослідницького інституту (SwRI) та General Electric Global Research (GE) ініціювала проект з проектування, будівництва, введення в експлуатацію та експлуатації універсальної та реконфігурованої установки надкритичного двоокису вуглецю. Ключовим у проекті є забезпечення сучасної продуктивності силового циклу S-CO₂ за високих температур від підтвердження концепції до прототипу системи, перевіреного в дії.

Швидкий розвиток промисловості призвів до екстенсивного споживання викопного палива, спричинивши різке зростання рівня CO₂ в атмосфері [3]. Викиди CO₂ в Китаї досягли $10,87 \times 10^9$ тон у 2021 році, що становить близько 31 % загальносвітових викидів CO₂. Основні джерела викидів CO₂ включають вугільні електростанції, металургійну та цементну промисловість. діоксид вуглецю є головним фактором глобального потепління та створює серйозну загрозу для Землі. Очищений CO₂ можна переробити для отримання комерційно цінних продуктів, або закачати в глибокі геологічні резервуари для зберігання. Зберігання CO₂ є важливою технологією для широкого впровадження та просування великомасштабних ініціатив [4].

CO₂ цикли також широко використовуються в технологіях видобутку корисних копалин. Ефективність вугільного циклу Брайтона (SCBC) із надкритичним CO₂ можна підвищити шляхом використання відпрацьованого тепла від охолодження S-

CO₂ і димових газів, яке наразі залишається здебільшого невикористаним. У статті [5] пропонуються два методи утилізації відпрацьованого тепла. Перший метод передбачає використання органічного циклу Ренкіна (ORC) для генерації додаткової енергії, тоді як другий метод використовує абсорбційний цикл охолодження для подальшого охолодження S-CO₂ на вході до компресора та, таким чином, зменшує споживання електроенергії на стиснення. Енергетично-економічно-екологічні багатокритеріальні моделі сформульовані для доступу до продуктивності вищезгаданих проектів і порівняння їх з автономною системою рекомпресорного циклу S-CO₂ Brayton.

Метою цього підрозділу роботи є бібліометричний аналіз на базі даних Scopus (2001-2024) та огляд основних тенденцій, пов'язаних із надкритичними циклами, які працюють у області критичної точки двоокису вуглецю.

Цей розділ містить детальне пояснення методології, яка використовується для проведення огляду літератури та формування бібліометричного аналізу. Базу даних Scopus було вибрано як основну базу даних для цього дослідження завдяки наявності в ній великої колекції документів. Оглянуто публікації за період з 2001 по 2024 роки, що охоплює значний часовий проміжок досліджень у цій галузі. Пошук літератури було проведено за певним запитом: “Supercritical”, “Cycle”, “Carbon dioxide”, “Equation of State”, “Energy Cycle”. Пошук за цими ключовими словами здійснювався в полях заголовка, анотації та ключових слів документів. Востаннє доступ до пошуку зроблено в лютому 2024. Було обмежено аналіз журналів, де публікувалися документи лише англійською мовою. Отримані результати були проаналізовані для визначення тенденцій і кількості робіт, класифікованих за типом журналу, тематикою та країнами. Крім того, для візуалізації зв'язків між країнами, журналами та ключовими словами отримані результати були графічно представлені з допомогою інструментів для аналізу Scopus.

На рис. 1.1 відображено розподіл робіт за обраними темами за значний проміжок часу. Аналіз даних показує, що кількість публікацій за темою надкритичних циклів двоокису вуглецю майже лінійно зростала з 2007 року до 2017

року, активність відповідних досліджень стала найбільшою з 2020 року та продовжує розвиватися й надалі.

Найбільша зацікавленість у роботах за темою надкритичних циклів двоокису вуглецю (рис. 1.2) розподілена між енергетичною сферою (21,1%) та сферою інжинірингу (23,6%). Галузь хімічної інженерії (12,5%) та наука про навколишнє середовище (10,3%) також займають важливе місце в дослідженнях надкритичних циклів двоокису вуглецю. Таким чином, головні предметні категорії підкреслюють міждисциплінарний характер досліджень надкритичних циклів двоокису вуглецю, причому галузі, орієнтовані на енергетику, інжиніринг, хімічну інженерію та навколишнє середовище, є найбільш помітними за обсягом публікацій.

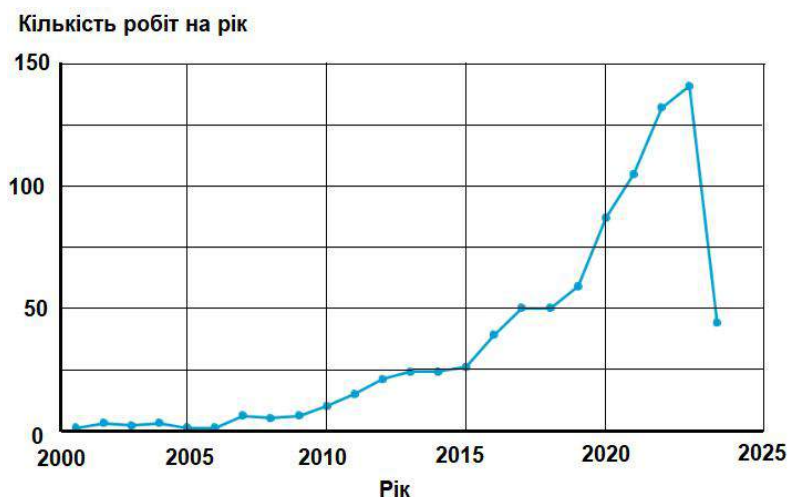


Рис. 1.1 Розподіл документів на тему надкритичних циклів двоокису вуглецю з 2001 р. до лютого 2024 р.

Було проведено аналіз п'яти найбільших джерел публікацій, пов'язаних із дослідженнями надкритичних циклів двоокису вуглецю. Як показано на рис. 1.3, переважна кількість документів була представлена та опублікована у джерелах ASME Turbo Expo, Energy й Applied Thermal Engineering, що відповідає важливості технології в енергетичній сфері.

Розподіл робіт по галузям науки та виробництва



Рис. 1.2. Аналіз документів по сфері застосовності

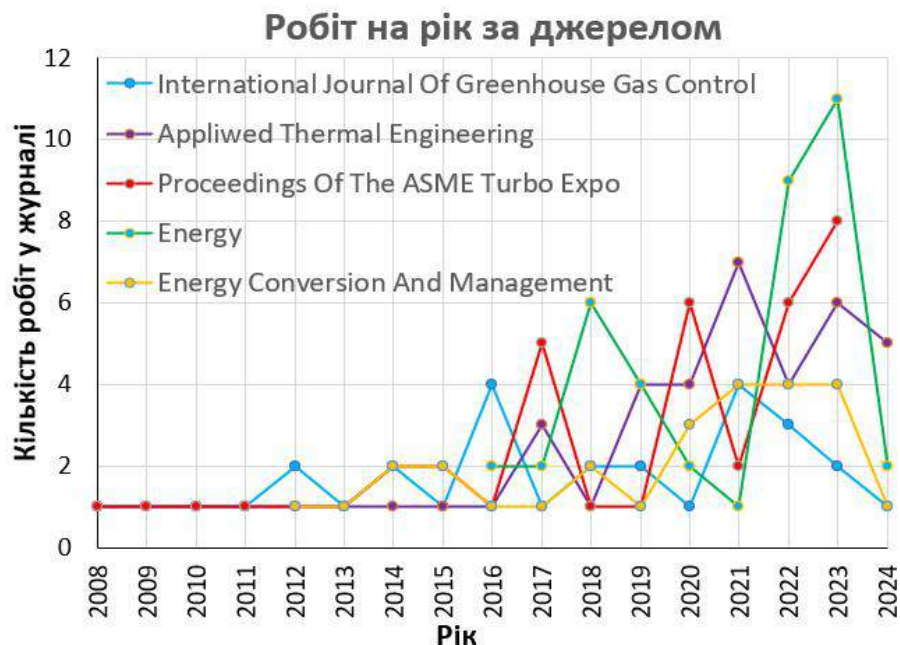


Рис. 1.3. Аналіз документів по джерелам

Представлені журнали в основному висвітлювали теми перетворення енергії та термодинаміки, що відображає міждисциплінарний характер досліджень. Загалом цей розподіл джерел підтверджує, що дослідження надкритичних циклів двоокису вуглецю публікуються як у загальних енергетичних, так і в спеціалізованих технічних журналах.

Аналіз по країнах, де проводиться найбільша кількість досліджень надкритичних циклів двоокису вуглецю, зображено на рис. 1.4. Три перших місця зі значним відривом займають Китай та США, а також Великобританія.

Успішна реалізація енергетичних надкритичних циклів CO_2 вимагає високої ефективності компресора як у проектній точці, так і в широкому робочому діапазоні, щоб максимізувати потужність циклу та підтримувати стабільну роботу перехідних процесів і умов роботи з частковим навантаженням. Ця вимога особливо актуальна для циклів з повітряним охолодженням, коли на вході до компресора густина має значну залежність від температури, яка має щоденні та сезонні коливання, а також суттєво змінюється під час перехідних процесів [6].

У документі [7] уперше представлено огляд технології компактних теплообмінників для застосування в енергетичному циклі надкритичного двоокису вуглецю, щоб забезпечити цілісне розуміння проектування енергетичної системи та вибору відповідних теплообмінників.

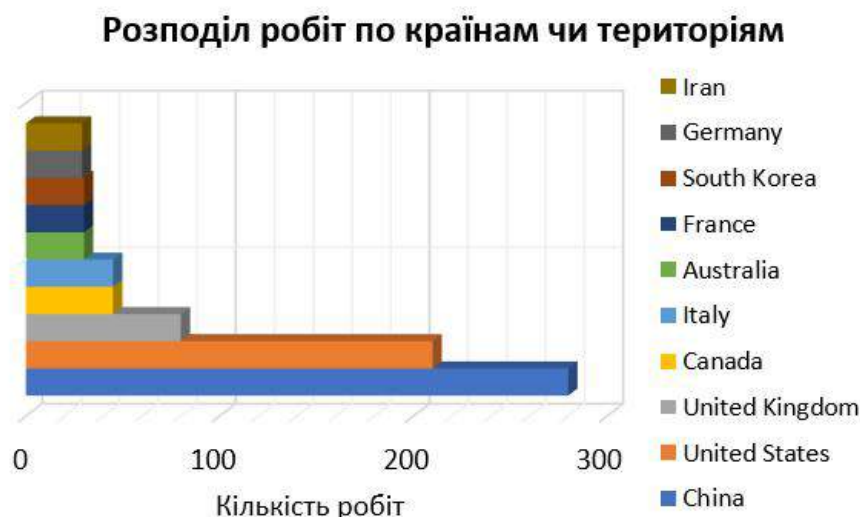


Рис. 1.4. Аналіз розповсюдження документів за країнами

Зацікавленість компактними теплообмінниками пов'язана з тим, що вони відіграють ключову роль у системі живлення S-CO_2 циклу, займаючи невелику площу та зберігаючи структурну цілісність. Цикл Брайтона з надкритичним двоокисом вуглецю (S-CO_2) обіцяє вищу ефективність і нижчі капітальні витрати, ніж традиційні парові енергетичні цикли Ренкіна. Однак для досягнення високої ефективності потрібні великі високоефективні рекуператори. Регенератори можуть бути недорогою альтернативою теплообмінникам із друкованими схемами та мікротрубками для рекуперації в енергетичних циклах S-CO_2 . Регенератори - це

періодичні теплообмінники, в яких теплова енергія витягується з гарячого потоку, зберігається в твердому середовищі, а потім передається в холодний потік [8]. Надкритичні енергетичні цикли S-CO₂ вважаються більш ефективним засобом заміни парового циклу Ренкіна у виробництві електроенергії. Однак компресори CO₂ для цього застосування не були добре розроблені. Було досліджено вплив температури на вході та тиску поблизу критичної точки на продуктивність компресора. Результати показують, що зміни температури на вході та тиску поблизу критичної точки мають великий вплив на продуктивність компресора [9]. Технологія циклу S-CO₂ адаптована майже для всіх існуючих джерел тепла, таких як сонячна, геотермальна, викопна енергія, атомні електростанції та системи рекуперації відпрацьованого тепла. Однак відомо, що оптимальні поєднання умов роботи, обладнання, робочої рідини та схеми циклу визначають максимальну ефективність циклу. В циклі S-CO₂ пристрій для стиснення має вирішальне значення, оскільки він працює поблизу критичної точки CO₂. Проте в цій області теплофізичні властивості CO₂ є дуже чутливими до змін тиску та температури. Тому урахування умов CO₂ на вході до компресора є критично важливим під час проектування таких циклів [10]. Для отримання найвищої ефективності циклу у відцентровому компресорі, умови на вході до якого близькі до критичної точки CO₂, він був розроблений з використанням спеціальних моделей рівноваги та рівняння стану, щоб належним чином враховувати області фазових змін і сильні градієнти термодинамічних властивостей. Що стосується розширювача, то в документі [11] було описано, як умови на вході (тиск і температура) викликають конкретні проблеми, зокрема для механічної конфігурації та безпечної роботи ключових компонентів, таких як сухі газові ущільнення (DGS), для яких проводився спеціальний термічний аналіз. Документ [11] завершується міркуваннями щодо вибору конструкції турбомашин, зроблених для покращення працездатності повного циклу навіть за непроекtnих умов, таких як наявність коливань мінімальної та максимальної температур CO₂ через зовнішні фактори.

У статті [12] розглянуто розробку відцентрового компресора S-CO₂. Для опису процесу циклу використано рівняння стану реального газу, а також моделі фазових

переходів. Найбільш складним є опис коливань температури та густини в фазових переходах та в околі критичної точки. Зазвичай, комерційні програмні пакети використовують стандартні моделі, які дають незадовільні результати для розрахунків із фазовими переходами. Альтернативним варіантом є імпорт моделі реального газу з використанням кросплатформної інтеграції кількох розрахункових пакетів високого рівня, наприклад, таких як NIST RefPROP або CoolPROP, проте в області критичної точки результати залишаються незадовільними. Таким чином, моделювання фазових переходів, опис стану рідкої фази реального газу та в околі його критичної точки з прийнятною точністю є актуальною задачею.

Надкритичний CO₂ цикл Аллама [13] має високу ефективність за проміжних температур завдяки високій швидкості стиснення в надкритичному режимі [14]. У [15] розроблено платформу тестового циклу потужністю 1 МВт для циклів S-CO₂ в рамках програми SunShot, що фінансується Міністерством енергетики США, і з 2015 року було досягнуто значних успіхів у моделюванні стану компонентів та експериментальних випробуваннях турбомашин S-CO₂, таких як проектний компресор Rinaldi та ін. [16], який використовував прототип Sandia Labs 250 kW як приклад для перевірки [17]. Хосаганді та ін. виконали аналіз у режимі on- і off-design з допомогою спеціального розв'язувача обчислювальної гідродинаміки (CFD), щоб зафіксувати певні характеристики S-CO₂ [18]. У роботі [19] представлено конструкцію радіального вхідного та осевого вихідного колектора осевої турбіни. Проте конструкція та випробування турбін високого тиску для циклів S-CO₂ все ще є мало задокументованими, за винятком дизайну середньої лінії [20] та дизайну радіальних турбін; у [21] оптимізовано турбіну з радіальним входом S-CO₂ на основі одновимірної схеми, а у [22] використано Ansys Fluent і глибоку нейронну мережу для оптимізації конструкції радіальної турбіни S-CO₂ потужністю 8 МВт [23].

Уведення надкритичного двоокису вуглецю як робочої рідини в цикл Брайтона може підвищити виробництво електроенергії. Однак під час проектування та розробки стабільного відцентрового компресора S-CO₂ для реалізації циклу Брайтона виникає низка проблем. Підхід до проектування 1D компресора

використовує моделі внутрішніх і зовнішніх витрат для оптимізації конструкції компресора. Одновимірний проектний код валідовано моделюванням CFD та експериментальними даними. Крім того, в документі розроблено, запропоновано та обговорено новий стабільний компресор для циклу Брайтона 10 МВт S-CO₂. Базуючись на коді 1D та результатах CFD, новий компресор демонструє покращений робочий діапазон. Результати CFD показали, що конденсація є неминучою під час роботи відцентрового компресора S-CO₂, однак конденсація не впливає істотно на продуктивність компресора [24].

Особливості термодинамічних функцій рідин у їх критичних точках не можуть бути описані аналітичними, класичними кубічними рівняннями стану. Їх можна описати рівняннями масштабування, але вони є точними лише поблизу критичної точки [25]. Показано, що параметричну версію масштабованих рівнянь Шофілда можна комбінувати з аналітичними рівняннями таким чином, щоб забезпечити більш точне представлення термодинамічних функцій для всіх показників густини та температури. Метод застосовано для діоксиду вуглецю та метану. Результати виявилися незадовільними поблизу критичної точки, де вільна енергія Гельмгольца, тиск та інші функції не будуть аналітичними функціями, тому цей метод дає недостатньо якісний опис реальної ситуації. Відомо, що фактична поведінка поблизу критичної точки практично однакова для всіх рідин і добре описується масштабними рівняннями, які в даний час існують в декількох варіантах для різних рідин. Ці рівняння використовуються тільки поблизу критичної точки, тому що їх форма абсолютно неприйнятна для інших значень густини й температури; наприклад, тиск не дорівнює нулю при нульовій густині [26]. Двопараметричні кубічні моделі використовують завдяки більшій точності обчислень під час моделювання як рідкої, так і парової фази при високих значеннях тиску [27]. Ці моделі також призначені для оцінювання умов експлуатації поблизу критичних значень через великий розкид густини в цій області [28].

Перша спроба прогнозування поведінки рідкої та парорідкої фаз належить Ван-дер-Ваальсу. Його рівняння стану реального газу засноване на молекулярній взаємодії. Однак розбіжності між теоретичним рівнянням Ван-дер-Ваальса та

даними експериментів були значними. Модифікації оригінального рівняння стану Ван-дер-Ваальса, такі як рівняння Редліха-Квонга, рівняння Гуггенхайма, рівняння Пенга-Робінсона, дають деякі позитивні кількісні результати, але універсальний опис термодинамічних властивостей для реальних газів у області рідкого та двофазного станів не був виконаний. Адаптація Анг'є рівняння Редліха-Квонга дозволила уточнити розрахунки газової фази в двофазній області з допомогою включення до розрахунку коефіцієнта ацентричності та додаткового емпіричного коефіцієнта, що покращило розрахунок біля критичної точки [29]. Соаве, Вілсон [30] і Барнс-Кінг [31] раніше включали аналогічні емпіричні коефіцієнти до вихідного рівняння Редліха-Квонга. Неточності в оцінці тиску відносно параметрів робочого тіла досліджувалися для всіх чотирьох можливих формулювань рівняння Редліха-Квонга, наведених вище. Найменшу неточність мала модель, запропонована Анг'є. Як оригінальне рівняння Редліха-Квонга, так і модифікація Анг'є не мають таких обмежень, але модифікація Анг'є є приблизно на 50 відсотків точнішою за оригінальне рівняння [31]. Поряд із попередніми рівняннями стану модифікація Анг'є, широко відома як рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є і часто використовується в провідних програмах для моделювання течії робочого тіла. Інша група рівнянь стану, заснована на енергії Гельмгольца [32], є більш точною в рідкій та двофазній областях. Істотними недоліками цих рівнянь є велика кількість коефіцієнтів, складна форма рівняння та великі обчислювальні витрати.

Різкі зміни теплофізичних властивостей в околі критичної точки викликають ефект значного прискорювання термодинамічних переходів рідини. У цьому дослідженні виконується обмежений геометричний дизайн із рідким CO₂, що проходить через критичну зону в мікроканалі. Таке формулювання задачі поєднує рівняння Нав'є-Стокса щодо стисливості з формулюваннями різних властивостей для отримання ефектів біля критичної точки. Три рівняння стану (Ван-дер-Ваальса, Редліха-Квонга та Пенга-Робінсона) та відповідні термодинамічні співвідношення виводяться під час розв'язання рівнянь потоку та рівнянь теплопередачі.

У дослідженні [33] представлено транскритичну модель руху CO₂ у мікрокапілярі з виходом за межі критичного тиску та стінки за критичної

температури. Вплив критичної точки на рідкий CO_2 виявлено шляхом включення до моделі складових рівняння Нав'є-Стокса з критичними коефіцієнтами. Степеневий закон масштабування термодинамічних властивостей в трьох наближених рівняннях стану, спрямованих на візуалізацію сингулярної поведінки поблизу критичної точки. Основні висновки цього дослідження є такими:

- Тиск зменшується лінійно (від 7,34 МПа до 7,42 МПа, перетинаючи критичне значення при $x = 16,6$ см) у мікроканалі. Однак швидкість, зумовлена тиском, демонструє різкі градієнти (збільшення від 0,82 м/с до 0,97 м/с, що становить 55,6%) навколо критичної області. Ця зворотна поведінка між тиском і швидкістю вказує на сильне розширення рідини та набагато швидшу динаміку критичного прискорення потоку в критичній області.

- У критичній області відбувається різке зниження густини (з 502 кг/м³ до 425 кг/м³) через значне розширення рідини. Каскадний ефект між ослабленою радіальною теплопровідністю та посиленням розширенням рідини в критичній області призводить до різкої зміни температури.

- Подібно до потоку ідеального газу в капілярній трубці, потік Пуазейля є основною динамічною структурою з домінуючим в'язким тертям. Максимальна швидкість Пуазейля в критичній області (1,05 м/с при $x = 15, 21$ см) набагато вища, ніж в інших місцях (приблизно 0,75 м/с при $x = 3, 9, 27$ см), підкреслюючи явище прискорення розширення в критичній області та дисбаланс між тиском, в'язкістю та інерційними (прискорювальними) силами.

- Три асимптотичні наближені рівняння стану дали якісно подібні результати. Розбіжності в початкових густинах на вході були пов'язані з урахуванням коефіцієнта молекулярного притягання.

- Питома теплоємність і коефіцієнти теплового розширення демонструють сильніші розбіжності в критичній області, що призводить до більш виражених коливань параметрів процесу в критичній області.

Стан рівноваги пар-рідина CO_2 зазвичай з'являється в трубопроводах для транспортування речовини, системах охолодження та великомасштабних системах транскритичного циклу. Однак поведінка раптових витоків у таких системах

залишається незрозумілою, що створює проблему для оцінювання ризику витoku. Ця робота зосереджена на поведінці декомпресії двофазного CO_2 з різними об'ємними частками парових фаз у витoku з трубопроводу високого тиску, зокрема з розробкою моделі обчислювальної гідродинаміки (CFD) з нерівноважним фазовим переходом і моделі реального газу. Результати свідчать про те, що рівняння стану Пенга-Робінсона є більш консервативним у прогнозуванні ступеня перегріву, ніж рівняння стану Спан-Вагнера. Крім того, виявлено, що початкова об'ємна частка парової фази CO_2 відіграє вирішальну роль у визначенні характеристик раптового витoku, таких як тиск, температура та швидкість хвилі декомпресії як усередині, так і поза трубою [34].

Цикл Брайтона надкритичного діоксиду вуглецю (S-CO_2) є важливою технологією виробництва електроенергії, яка пропонує потенційні переваги з точки зору ефективності циклу [35]. Як робоча рідина CO_2 має добру стабільність і добре зберігається. У надкритичному стані CO_2 має велику питому теплоємність, велику стисливість, велику густину, низьку в'язкість та інші властивості, які можуть значно зменшити роботу стиснення, а потім підвищити ефективність циклу [36]. Чим ближче умови на вході до критичної точки, тим вища продуктивність системи [37]. Однак, коли стан на вході до компресора наближається до критичної точки, теплофізичні властивості CO_2 різко змінюються, значно відхиляються від властивостей ідеального газу та демонструють сильний ефект реального газу [38]. З іншого боку, критичною точкою є кінець лінії насичення. Коли умови на вході до компресора наближаються до критичної точки, кавітація та конденсація можуть виникнути в каналі лопаті робочого колеса через локальне прискорення потоку [39]. На рис. 5 процеси зміни фази зображено на діаграмі тиск–температура. Робоче тіло ізоентропно розширюється від надкритичної області (точка А) до газової області (рис. 1.5), а потім досягає лінії насичення (точка В). Зміна фази проявляється як конденсація, коли краплі утворюються в газовому середовищі. Конденсація не відбувається відразу після досягнення лінії насичення. Робоча рідина переходить у метастабільний стан, поки не досягне лінії Вільсона (точка D), де буде запущений процес спонтанного зародження [40]. Нарешті, рідина повернеться до рівноваги

(точка E). Якщо конденсація є рівноважною, рідина конденсуватиметься вздовж лінії насичення (від точки B до точки C). Процес кавітації починається в надкритичних умовах (A'), які ближче до рідкої фази. Рідина також розширюється ізоентропно, проходить через область рідини та досягає лінії насичення (точка B'). Рідина має низьку стисливість, що призводить до невеликого перепаду температури та великого перепаду тиску. Рідина продовжує розширюватися до точки D', а потім виникає кавітація. Зміна фази зазвичай відбувається на стороні всмоктування. Конденсація та кавітація не відбуваються одночасно.

У газовому середовищі відбувається конденсація, а в рідкому – кавітація. Краплі конденсату на лопаті робочого колеса можуть ще більше погіршити продуктивність компресора або спричинити ерозію [41].

Кавітація може генерувати велику кількість бульбашок, і бульбашки займають більшу частину каналу, що призводить до блокування [42]. Крім того, можливо, що температура та тиск рідини S-CO₂ опустяться нижче критичної точки та пройдуть через лінію насичення, що спричинить зміну фази під час запуску-зупинки компресора та непроекtnих налаштувань. Було проведено кілька експериментів щодо потоку та зміни фази компресорів S-CO₂.

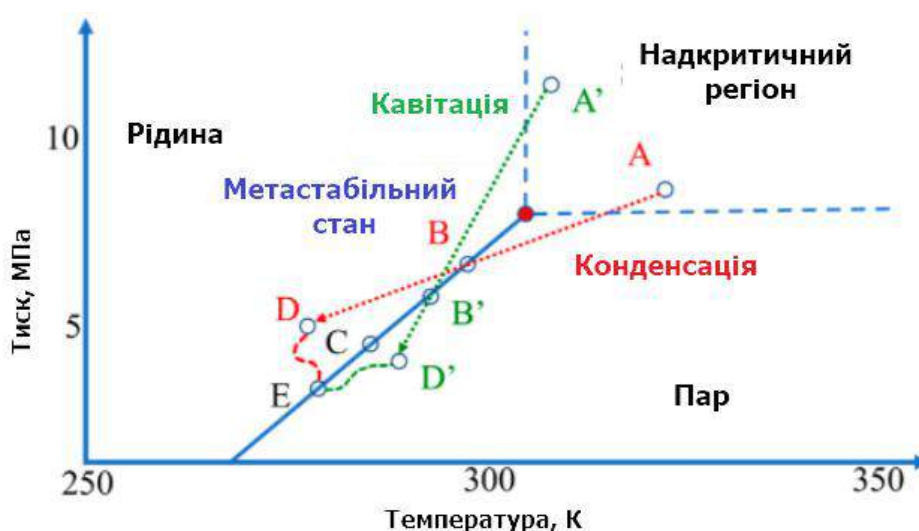


Рис. 1.5. Метастабільний стан та зміна фаз для двоокису вуглецю

Дослідження національних лабораторій Sandia показали, що компресор S-CO₂ може стабільно працювати незалежно від того, в якій фазі перебувають умови входу [43]. У [44] вважається, що компресор може досягти довготривалої стабільної роботи за умов двофазного входу, який обмежений низькою швидкістю обертання. Попередні дослідження стосуються загальної продуктивності компресора й не дають чіткої картини специфічних характеристик внутрішнього потоку компресора S-CO₂. Досі важко виміряти параметри внутрішнього потоку через малий розмір робочого колеса. Хоча деякі дослідження стверджують, що зміна фази мало впливає на продуктивність компресора, більшість досліджень розглядають потенційну роботу в двофазній області як високий ризик і не рекомендують її для високонадійних систем [45]. Таким чином, необхідно дослідити кількісний вплив майже критичної нерівноважної зміни фази на продуктивність відцентрового компресора S-CO₂ і надати теоретичні вказівки щодо розробки та стратегії експлуатації компресорів S-CO₂.

1.2 Аналіз рівнянь стану, які застосовуються для моделювання тривимірних потоків в умовах надкритичних циклів CO₂

Успішна реалізація енергетичних надкритичних циклів CO₂ вимагає високої ефективності компресора як у проектній точці, так і в широкому робочому діапазоні, щоб максимізувати потужність циклу та підтримувати стабільність перехідних процесів і роботи з частковим навантаженням. Ця вимога особливо актуальна для циклів з повітряним охолодженням, де густина на вході до компресора має значну залежність від температури на вході, яка піддається щоденним і сезонним коливанням, а також перехідним процесам [46]. У документі [47] вперше представлено огляд технології компактних теплообмінників для застосування в енергетичному циклі надкритичного двоокису вуглецю, щоб забезпечити цілісне розуміння проектування енергетичної системи та вибору відповідних теплообмінників. Це пов'язано з тим, що компактний теплообмінник відіграє ключову роль у системі живлення S-CO₂ циклу, займаючи невелику площу та зберігаючи структурну цілісність.

Рівняння стану (РС), що мають велику кількість параметрів із цілими й дробовими ступенями густини та температури, в тому числі експоненціальні параметри, використовують для отримання довідкових таблиць термодинамічних властивостей однокомпонентних речовин. Кількість констант у цих рівняннях сягає 50-100 і більше. Найбільш відомі довідкові таблиці [48], розраховані для CO_2 за багатьма постійними регулярними РС Спана і Вагнера (більше 80 коефіцієнтів). У статтях [49] і [50] представлено комбіновані рівняння стану, що включають нове 11-параметричне рівняння стану для регулярної області та масштабове 6-параметричне рівняння стану для критичної області, уніфікований опис термодинамічних і калорійних властивостей вуглекислого газу та гелію. У статті [51] пропонується масштабове кубічне рівняння стану. Великі відхилення спостерігалися в описі критичних ліній сумішей. Як регулярну частину рівняння використовували рівняння стану Соаве-Редліха-Квонга. У роботі [52] було обґрунтовано процедуру з'єднання масштабного методу та багатопараметричного рівняння стану з використанням CO_2 як робочого тіла. Для досягнення швидкої ефективності під час віддалення від критичної точки пропонується масштабна функція 8-го порядку, яка швидко зменшується по мірі віддалення від критичної точки.

Завданням дослідження та представленої роботи є визначення основних термодинамічних параметрів з найменшою похибкою відносно експериментальних даних для вуглекислого газу в навіколокритичній області (304,13 К). Математична модель визначення тиску біля критичної точки базується на модифікованому рівнянні стану Редліха-Квонга-Анг'є [53] у вигляді регулярних частин та масштабного рівняння стану. У якості з'єднання між регулярною і масштабною частинами використовується класична функція ймовірності гасіння коливань температури й густини [54]. У роботі [55] представлено метод визначення основних термодинамічних властивостей двофазної області діоксиду вуглецю. Цей метод спирається на модифіковане Анг'є рівняння стану Редліха-Квонга, яке дозволяє з достатньою точністю прогнозувати властивості робочого тіла в двофазній області. Математичну модель [56] було вирішено модифікувати для використання у навіколокритичній області CO_2 .

Робочий розподіл CO_2 , показаний на рис. 1.6, можна умовно розділити на такі частини: область I – газова та надкритична фаза, область II – двофазна парорідка область, область III – рідка фаза, область IV - критична точка.

Вихідні дані є загальними для всього робочого розподілу: властивості робочого тіла, коефіцієнти, що використано в рівняннях, поточна температура та густина.

В області I рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є можна використовувати без будь-яких модифікацій. Тиск, отриманий з цього рівняння, добре узгоджується з експериментальними результатами.

В області II розв'язується кубічне рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є відносно об'єму. Тиск для цього рівняння є тиском насиченої пари й знаходиться за методом Лі-Кеслера. Цей метод дає гарний збіг із експериментальними даними. Під час розв'язання кубічного рівняння можуть бути отримані три корені. Найбільший відповідає об'єму парової фази, найменший – об'єму рідкої фази. Об'єм парової фази гарно узгоджується з експериментальними результатами. Похибка визначення об'єму рідкої фази є більшою за 10%, тому було вирішено використати емпіричне рівняння Ямади-Ганна, яке добре узгоджується з експериментальними даними.

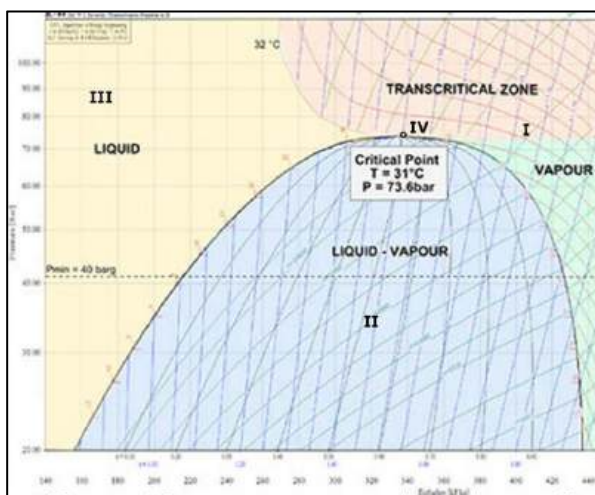


Рис. 1.6. Робоча область CO_2

В області III розв'язується рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є з масштабною похибкою у рівнянні коефіцієнта $A(T)$. Модифіковане рівняння Редліха-Квонга-Анг'є дає задовільний збіг з експериментальними даними для рідкої області, особливо поблизу лінії насичення.

Область IV використовує масштабове рівняння стану як поправку густини й температури та рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для визначення тиску. У масштабове рівняння введено поправку, що дозволяє використовувати рівняння в області біля критичної точки. Результати, отримані з використанням синтезу рівнянь, задовільно збігаються з експериментальними даними.

Розрахункові області пов'язані між собою групою умов, що дозволяє розв'язувачу переходити з однієї області до іншої під час ітераційного процесу.

Крім того, використовувалося рівняння тиску плавлення, що дозволяє обмежити роботу CO₂ лінією плавлення в залежності від поточної температури.

Стисле пояснення алгоритму показано на рис. 1.7.

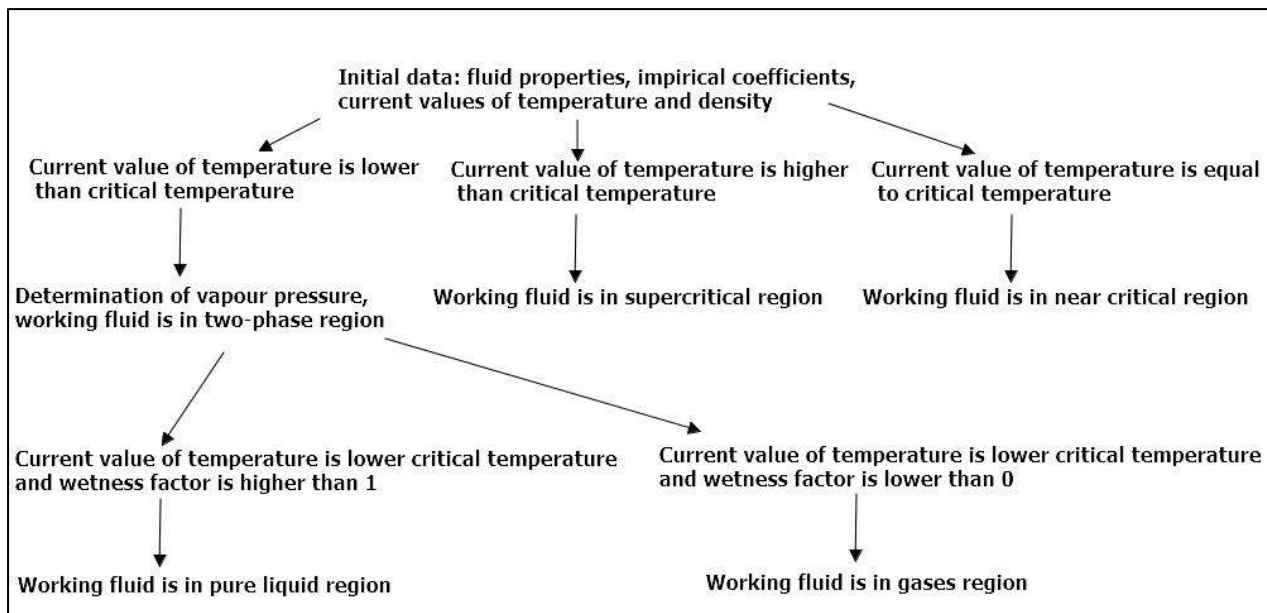


Рис. 1.7. Алгоритм опису робочого діапазону CO₂

1.3 Висновки до першого розділу

В результаті проведеного аналізу предметної області та існуючих методів моделювання тривимірної течії у компресорі надкритичних циклів CO₂ можна зробити наступні висновки:

- Технологія циклу S-CO₂ адаптована майже для всіх існуючих джерел тепла, таких як сонячна, геотермальна, викопна енергія, атомні електростанції та системи рекуперації відпрацьованого тепла. Відомо, що оптимальне поєднання умов роботи,

обладнання, робочої рідини та схеми циклу визначає максимальну ефективність циклу.

- У циклі S-CO₂ пристрій для стиснення має вирішальне значення, оскільки він працює поблизу критичної точки CO₂. Проте поблизу критичної точки теплофізичні властивості CO₂ є дуже чутливими до змін тиску та температури. Тому властивості CO₂ на вході до компресора є критичними під час проектування таких циклів.

- Розглянуто різноманітні рівняння стану реального газу, які здатні описати фазові переходи першого та другого роду із найменшою похибкою відносно результатів експериментів для S-CO₂ циклів.

- Виявлено і сформульовано проблему моделювання фазових переходів та роботи компресорів у областях двофазного та рідкого станів CO₂, коли умови роботи компресора знаходяться у безпосередній близькості до критичної точки робочого тіла.

- Відповідно, для розв'язання сформульованої проблеми необхідно вирішити такі задачі:

1. 1D/2D моделювання процесів у відцентровому компресорі, який є складовою надкритичного циклу CO₂ та працює поблизу критичної точки CO₂ для забезпечення максимальної ефективності циклу.

2. Оцінити можливість моделювання потоку в тривимірному просторі компресора на різних режимах його роботи в умовах надкритичного циклу CO₂.

3. Розробити чи модифікувати рівняння стану реального газу для можливості моделювати потік робочого тіла в компресорі зі зниженою похибкою у порівнянні з оригінальним рівнянням стану.

4. Впровадити розроблену модель рівняння стану реального газу до програмного пакету обчислювальної математики FEA AxCFD™.

Бібліометричний аналіз області застосування надкритичних циклів CO₂ у галузі енергетичного машинобудування опубліковано в роботі авторки [57].

1.4 Література до першого розділу

- [1] Wright, S. A., Conboy, T. M., Radel, R. F., & Rochau, G. E. (2011). Modeling And Experimental Results For Condensing Supercritical CO₂ Power Cycles (No. SAND2010-8840). Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States). <https://doi.org/10.2172/1030354>
- [2] Lock, A., & Bone, V. (2022). Off-Design Operation Of The Dry-Cooled Supercritical CO₂ Power Cycle. *Energy Conversion and Management*, 251, 114903. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114903>
- [3] Lin, X., Li, X., Liu, H., Boczkaj, G., Cao, Y., & Wang, C. (2024). A Review On Carbon Storage Via Mineral Carbonation: Bibliometric Analysis, Research Advances, Challenge, And Perspectives. *Separation and Purification Technology*, 126558. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.126558>
- [4] Huang, Y., Zheng, X., Wei, Y., He, Q., Yan, S., & Ji, L. (2022). Protonated Amines Mediated CO₂ Mineralization Of Coal Fly Ash And Polymorph Selection Of CaCO₃. *Chemical Engineering Journal*, 450, 138121. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.138121>
- [5] Liang, Y., Chen, W., Luo, X., Chen, J., Yang, Z., & Chen, Y. (2024). Multi-Objective Optimization Of Supercritical CO₂ Brayton Cycles For Coal-Fired Power Generation With Two Waste Heat Recovery Schemes. *Energy Conversion and Management*, 300, 117962. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117962>
- [6] Allison, T. C., Smith, N. R., Pelton, R., Wilkes, J. C., & Jung, S. (2019). Experimental Validation Of A Wide-Range Centrifugal Compressor Stage For Supercritical CO₂ Power Cycles. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 141(6), 061011. <https://doi.org/10.1115/1.4041920>
- [7] Kwon, J. S., Son, S., Heo, J. Y., & Lee, J. I. (2020). Compact Heat Exchangers For Supercritical CO₂ Power Cycle Application. *Energy Conversion and Management*, 209, 112666. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.112666>
- [8] Reznicek, E. P., Hinze, J. F., Nellis, G. F., Anderson, M. H., & Braun, R. J. (2021). Simulation Of The Supercritical CO₂ Recompression Brayton Power Cycle With A High-

Temperature Regenerator. *Energy Conversion and Management*, 229, 113678.
<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113678>

[9] Jiang, P., Wang, B., Tian, Y., Xu, X., & Zhao, L. (2021). Design of a Supercritical CO₂ Compressor for Use in a 1 MWe Power Cycle. *ACS omega*, 6(49), 33769-33778.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.1c05023>

[10] Vesely, L., Manikantachari, K. R. V., Vasu, S., Kapat, J., Dostal, V., & Martin, S. (2019). Effect Of Impurities On Compressor And Cooler In Supercritical CO₂ Cycles. *Journal of energy resources technology*, 141(1), 012003.
<https://doi.org/10.1115/1.4040581>

[11] Toni, L., Bisio, V., Milani, A., Biliotti, D., Bellobuono, E. F., Valente, R., ... & Generini, G. (2023, June). Supercritical CO₂ Compressor And Expander Design For Industrial Waste-Heat Valorization. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 87073, p. V012T28A016). American Society of Mechanical Engineers.
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/202341402012>

[12] Wright, S. A., Radel, R. F., Vernon, M. E., Pickard, P. S., & Rochau, G. E. (2010). Operation And Analysis Of A Supercritical CO₂ Brayton Cycle (No. SAND2010-0171). Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States). <https://doi.org/10.2172/984129>

[13] Allam, R. J., Palmer, M. R., Brown Jr, G. W., Fetvedt, J., Freed, D., Nomoto, H., ... & Jones Jr, C. (2013). High Efficiency And Low Cost Of Electricity Generation From Fossil Fuels While Eliminating Atmospheric Emissions, Including Carbon Dioxide. *Energy Procedia*, 37, 1135-1149. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.05.211>

[14] Crespi, F., Gavagnin, G., Sánchez, D., & Martínez, G. S. (2017). Supercritical Carbon Dioxide Cycles For Power Generation: A Review. *Applied energy*, 195, 152-183.
<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.02.048>

[15] Moore, J., Brun, K., Evans, N., & Kalra, C. (2015, June). Development Of 1 Mwe Supercritical CO₂ Test Loop. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 56802, p. V009T36A015). American Society of Mechanical Engineers.
<https://doi.org/10.1115/GT2017-64287>

- [16] Rinaldi, E., Pecnik, R., & Colonna, P. (2015). Computational Fluid Dynamic Simulation Of A Supercritical CO₂ Compressor Performance Map. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 137(7), 072602. <https://doi.org/10.1115/1.4029121>
- [17] Wright, S. A., Radel, R. F., Vernon, M. E., Pickard, P. S., & Rochau, G. E. (2010). Operation And Analysis Of A Supercritical CO₂ Brayton Cycle (No. SAND2010-0171). Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States). <https://doi.org/10.2172/984129>
- [18] Hosangadi, A., Weathers, T., Liu, J., Pelton, R., Wygant, K., & Wilkes, J. (2022). Numerical Predictions Of Mean Performance And Dynamic Behavior Of A 10 Mwe SCO₂ Compressor With Test Data Validation. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 144(12), 121019. <https://doi.org/10.1115/1.4055532>
- [19] Cich, S. D., Moore, J. J., Marshall, M., Hoopes, K., Mortzheim, J., & Hofer, D. (2019, June). Radial Inlet And Exit Design For A 10 Mwe SCO₂ Axial Turbine. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 58721, p. V009T38A005). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/GT2019-90392>
- [20] Uysal, S. C., & Weiland, N. (2022). Turbomachinery Design Of An Axial Turbine For A Direct Fired S-CO₂ Cycle. *Energy Conversion and Management*, 267, 115913. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.115913>
- [21] Noall, J. S., & Pasch, J. J. (2014, September). Achievable Efficiency And Stability Of Supercritical CO₂ Compression Systems. In *Supercritical CO₂ Power Cycle Symposium*. Pennsylvania Pittsburgh. ID: 139085468
- [22] Zhou, K., Wang, J., Xia, J., Guo, Y., Zhao, P., & Dai, Y. (2020). Design And Performance Analysis Of A Supercritical CO₂ Radial Inflow Turbine. *Applied Thermal Engineering*, 167, 114757. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.114757>
- [23] Tuite, L., Braun, J., & Paniagua, G. (2024). Optimization of an High Pressure Turbine Blade and Sector-Based Annular Rig Design for Supercritical CO₂ Power Cycle Representative Testing. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 146(6). <https://doi.org/10.1115/1.4063956>

- [24] Hosseinpour, J., Messele, M., & Engeda, A. (2024). Design And Development Of A Stable Supercritical CO₂ Centrifugal Compressor. *Thermal Science and Engineering Progress*, 47, 102273. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2023.102273>
- [25] Redlich, Otto, and Joseph NS Kwong. (1949). On The Thermodynamics Of Solutions. V. An Equation Of State. Fugacities Of Gaseous Solutions. *Chemical reviews* 44, no. 1. 233-244. <https://doi.org/10.1021/cr60137a013>
- [26] Soave, Giorgio. (1972). Equilibrium Constants From A Modified Redlich-Kwong Equation Of State. *Chemical engineering science* 27, no. 6. 1197-1203. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4)
- [27] Peng, Ding-Yu, and Donald B. Robinson. (1976). A New Two-Constant Equation Of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 15, no. 1 (1976): 59-64. <https://doi.org/10.1021/i160057a011>
- [28] Aungier, R. H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation Of State For Fluid Dynamic Analysis Applications. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117, iss. 2, pp. 277–281. <https://doi.org/10.1115/1.2817141>.
- [29] Haghtalab, A., Mahmoodi, P., & Mazloumi, S. H. (2011). A Modified Peng–Robinson Equation Of State For Phase Equilibrium Calculation Of Liquefied, Synthetic Natural Gas, And Gas Condensate Mixtures. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 89, iss. 6, pp. 1376–1387. <https://doi.org/10.1002/cjce.20519>.
- [30] Thamanavat, K., Sun, T., & Teja, A. S. (2009). High-Pressure Phase Equilibria In The Carbon Dioxide+ Pyrrole System. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 275, iss. 1, pp. 60–63. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2008.09.019>.
- [31] Chapoy, A., Ahmadi, P., de Oliveira Cavalcanti Filho, V., & Jadhawar, P. (2020). Vapour-Liquid Equilibrium Data For The Carbon Dioxide (CO₂)+ Carbon Monoxide (CO) System. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 150, paper 106180. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2020.106180>.
- [32] Wilson, G. M. (1966). Calculation Of Enthalpy Data From A Modified Redlich-Kwong Equation Of State. *Advances in Cryogenic Engineering*, vol. 11, pp. 392–400. https://doi.org/10.1007/978-1-4757-0522-5_43.

- [33] Span, Roland, and Wolfgang Wagner. (1996). A New Equation Of State For Carbon Dioxide Covering The Fluid Region From The Triple - Point Temperature To 1100 K At Pressures Up To 800 Mpa. *Journal of physical and chemical reference data* 25, no. 6: 1509-1596. <https://doi.org/10.1063/1.555991>
- [34] Cho, J., Shin, H., Cho, J., Kang, Y. S., Ra, H. S., Roh, C., ... & Baik, Y. J. (2017). Preliminary Experimental Study Of A Supercritical CO₂ Power Cycle Test Loop With A High-Speed Turbo-Generator Using R134a Under Similarity Conditions. *Frontiers in Energy*, 11, 452-460. <https://doi.org/10.1007/s11708-017-0504-4>
- [35] Cheng, W. L., Huang, W. X., & Nian, Y. L. (2017). Global Parameter Optimization And Criterion Formula Of Supercritical Carbon Dioxide Brayton Cycle With Recompression. *Energy Conversion and Management*, 150, 669-677. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.08.055>
- [36] Feher, E. G. (1968). The Supercritical Thermodynamic Power Cycle. *Energy conversion*, 8(2), 85-90. [https://doi.org/10.1016/0013-7480\(68\)90105-8](https://doi.org/10.1016/0013-7480(68)90105-8)
- [37] Dostal, V., Driscoll, M. J., & Hejzlar, P. (2004). A Supercritical Carbon Dioxide Cycle For Next Generation Nuclear Reactors. (Doctoral dissertation, Massachusetts Institute of Technology, Department of Nuclear Engineering). 109109894
- [38] Chang, Z., Zhao, Y., Zhao, Y., Liu, G., Yang, Q., & Li, L. (2024). Research On Recompression Supercritical CO₂ Power Cycle System Considering Performance And Stability Of Main Compressor. *Applied Thermal Engineering*, 240, 122283. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.122283>
- [39] Baltadjiev, N. D., Lettieri, C., & Spakovszky, Z. S. (2015). An Investigation Of Real Gas Effects In Supercritical CO₂ Centrifugal Compressors. *Journal of Turbomachinery*, 137(9), 091003. <https://doi.org/10.1115/1.4029616>
- [40] Pei, J., Zhao, Y., Zhao, M., Liu, G., Yang, Q., & Li, L. (2022). Effects Of Leading Edge Profiles On Flow Behavior And Performance Of Supercritical CO₂ Centrifugal Compressor. *International Journal of Mechanical Sciences*, 229, 107520. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2022.107520>

- [41] Gyarmathy, G. (2005). Nucleation Of Steam In High-Pressure Nozzle Experiments. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 219(6), 511-521. <https://doi.org/10.1243/095765005X31388>
- [42] Shao, W., Yang, J., Wang, X., & Ma, Z. (2020). A Real Gas-Based Throughflow Method For The Analysis Of SCO_2 Centrifugal Compressors. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 234(10), 1943-1958. <https://doi.org/10.1177/0954406220902188>
- [43] Poerner, M., Beck, G., Musgrove, G., & Nolen, C. (2016). Understanding Wet Gas in a Supercritical Carbon Dioxide Cycle. In *The 5th International Symposium-Supercritical CO_2 Power Cycles*, March 28-31, 2016, San Antonio, Texas. 201761952
- [44] Persico, G., Gaetani, P., Romei, A., Toni, L., Bellobuono, E. F., & Valente, R. (2021). Implications Of Phase Change On The Aerodynamics Of Centrifugal Compressors For Supercritical Carbon Dioxide Applications. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 143(4), 041007. <https://doi.org/10.1115/1.4049924>
- [45] Hosangadi, A., Liu, Z., Weathers, T., Ahuja, V., & Busby, J. (2019). Modeling Multiphase Effects In CO_2 Compressors At Subcritical Inlet Conditions. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 141(8), 081005. <https://doi.org/10.1115/1.4042975>
- [46] Wright, S. A., Conboy, T. M., Radel, R. F., & Rochau, G. E. (2011). Modeling And Experimental Results For Condensing Supercritical CO_2 Power Cycles (No. SAND2010-8840). Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States).
- [47] Lock, A., & Bone, V. (2022). Off-Design Operation Of The Dry-Cooled Supercritical CO_2 Power Cycle. *Energy Conversion and Management*, 251, 114903.
- [48] Peng, Ding-Yu, and Donald B. Robinson. (1976). A New Two-Constant Equation Of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 15, no. 1: 59-64. <https://doi.org/10.1021/i160057a011>
- [49] Aungier, R. H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation Of State For Fluid Dynamic Analysis Applications. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117, iss. 2, pp. 277–281. <https://doi.org/10.1115/1.2817141>.

[50] Wilson, G. M. (1966). Calculation Of Enthalpy Data From A Modified Redlich-Kwong Equation Of State. *Advances in Cryogenic Engineering*, vol. 11, pp. 392–400. https://doi.org/10.1007/978-1-4757-0522-5_43.

[51] King, C. J., Foss, A. S., Grens, E. A., Lynn, S., & Rudd, D. F. (1973). Chemical Process Design And Engineering. *Chemical Engineering Education*, vol. 7, iss. 2, pp. 72–74.

[52] Aungier, Ronald H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation Of State For Fluid Dynamic Analysis Applications. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117, iss. 2, pp. 277–281. <https://doi.org/10.1115/1.2817141>.

[53] ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide
https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/main_pre.htm.

[54] Span, Roland, and Wolfgang Wagner. (1996). A New Equation Of State For Carbon Dioxide Covering The Fluid Region From The Triple - Point Temperature To 1100 K At Pressures Up To 800 MPa. *Journal of physical and chemical reference data* 25, no. 6: 1509-1596. <https://doi.org/10.1063/1.555991>

[55] Wagner, Wolfgang, and Hans-Joachim Kretzschmar. (2008). IAPWS Industrial Formulation 1997 For The Thermodynamic Properties Of Water And Steam. *International steam tables: properties of water and steam based on the industrial formulation IAPWS-IF97*: 7-150. https://doi.org/10.1007/978-3-662-53219-5_3

[56] Povodyrev, A. A., Jin, G. X., Kiselev, S. B., & Sengers, J. V. (1996). Crossover Equation Of State For The Thermodynamic Properties Of Mixtures Of Methane And Ethane In The Critical Region. *International Journal of Thermophysics*, 17(4), 909–944. <https://doi.org/10.1007/bf01439196>

[57] Воробйова, Г. С. (2024). Огляд і бібліометричне дослідження надкритичних енергетичних циклів CO₂. Поточний стан досліджень і розробок. *Авіаційно-космічна техніка і технологія*, 2024, №3(195). <https://doi.org/10.32620/aktt.2024.3.07>.

РОЗДІЛ 2. АНАЛІЗ ЦИКЛУ S-CO₂ ТА МЕТОДИКИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

У першому розділі описано деякі модифікації компресорних циклів S-CO₂ та показано важливість вибору компонентів циклу в залежності від умов циклу та робочого тіла. Для наукового дослідження, описаного в дисертації, був використаний S-CO₂ компресорний цикл, розроблений у Sandia National Laboratories [1]. Дані експериментальних та/або численних досліджень цього компресора будуть використані для моделювання одновимірних і тривимірних течій з визначенням межі застосування розробленої у дисертації математичної моделі рівняння стану реального газу в області критичної точки та при фазових переходах.

2.1 Опис S-CO₂ компресорного циклу

Компресорний цикл використовує турбокомпресор, який працює в паровій та рідкій фазах, поблизу критичної точки, вище критичної точки та навіть на лінії насичення.

Рис. 2.1 демонструє розташування обладнання, що реалізує S-CO₂ компресорний цикл. Воно розміщено на опорі розміром 2м x 3м і містить відцентровий компресор (потужністю 50 кВт) з приводом від мотора з контролером генератора, контрольні точки виміру масової витрати (за компресором) і перепаду тиску (в турбіні), кожухо-трубчастий газовий охолоджувач, системи пристроїв для контролю тиску. Це обладнання є модульним та розбірним, що дозволяє розділити процес тестування на етапи.

Схематичне зображення системи, що реалізує компресорний цикл і включає охолоджуючий водяний контур, наведено на рис. 2.2. Крім того, на рис. 2.2 представлено оцінку параметрів потоку, засновану на термодинамічному аналізі циклу, температури, тиску, масової витрати та рівнянні потужності. Основний компресор спроектовано на 75000 об/хв із перепадом тиску 1,8 та масовою витратою 3,5 кг/с. Температурний перепад на газовому охолоджувачі дорівнює 0,7 К. Така невелика зміна температури на охолоджувачі для значної величини

витрати призводить до відхилення термодинамічних властивостей CO_2 поблизу критичної точки та похибки вимірювання.

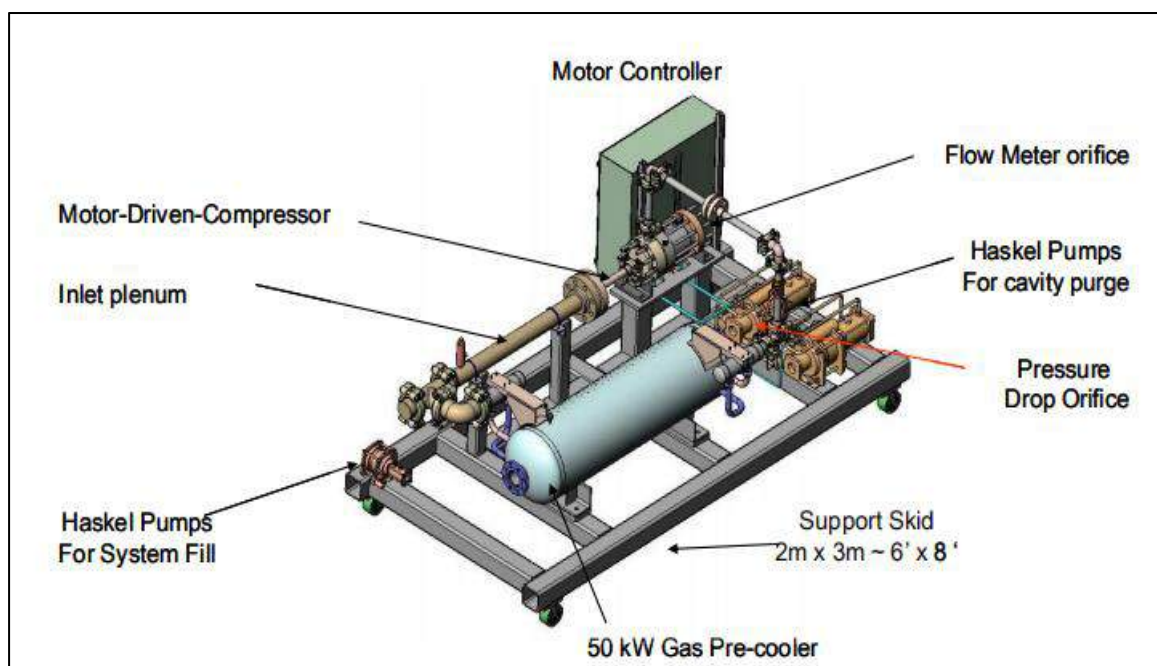


Рис. 2.1. Розташування елементів обладнання, що реалізує компресорний цикл

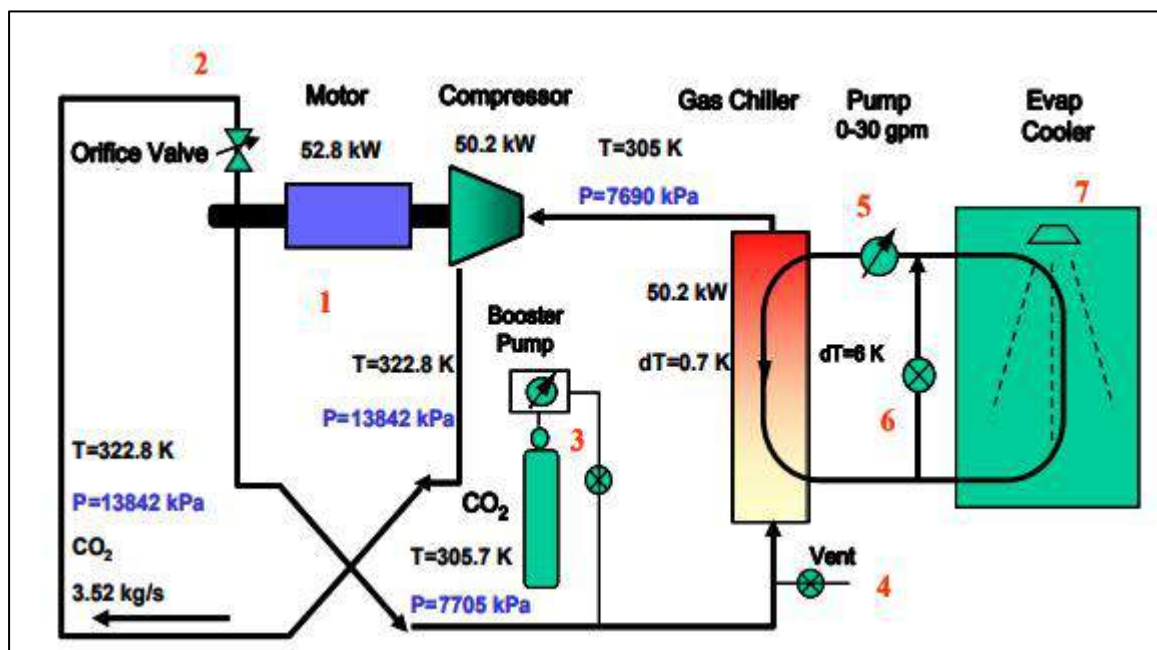


Рис. 2.2. Схематичне зображення системи, що реалізує компресорний цикл

Обладнання для реалізації CO_2 компресорного циклу в різних конфігураціях було випробувано понад 80 разів, починаючи з червня 2008 року. Фото установки

представлено на рис. 2.3. Ключовим компонентом установки є моторно-компресорний модуль.



Рис. 2.3. Експериментальна установка під час експлуатації

Робочий цикл S-CO₂ показано на діаграмі T-S (рис. 2.4). Зелені точки входу показують близькі значення температури та ентропії газового охолоджувача на вході, значення на вході та виході компресора. Червоні лінії показують граничні умови на вході до компресора. Ці лінії розташовані так, щоб густина за такими граничними умовами була постійною. У процесі стиснення (вертикальна зелена лінія), включаючи перепад тиску 1,8, густина змінюється в межах 10% (від 0,608 кг/л до 0,670 кг/л). Ця невелика різниця пов'язана з високою густиною рідини і в цьому регіоні параметри робочого тіла значно відрізняються від тих, що визначаються за ідеально-газовою теорією. При цьому потужність компресора мала, що пояснює високу ефективність циклу S-CO₂. Іншою важливою властивістю неідеально-газової поведінки робочого тіла є значне підвищення питомої теплоємності в області, близькій до критичної. Процес пароутворення починається нижче критичної температури (31 °C), але все ще над «куполом» лінії насичення. У цьому випадку питома теплоємність значно зростає. Також у процесі пароутворення значно зменшується густина та збільшується в'язкість. Крім того, підвищення питомої теплоємності призводить до підвищення коефіцієнта тепловіддачі, тому що

теплопередача у навколокритичній ділянці є процесом пароутворення/конденсації в двофазній області й практично відбувається при постійній температурі. Цей ефект пояснює незначний перепад температури в газовому охолоджувачі, що забезпечує ефективність циклу.

Ефект псевдокритичної точки наочно проявляється в робочій точці на рис. 2.4. Тут температурний перепад у газовому охолоджувачі всього лише 0,7 К, що призводить до значного підвищення питомої теплоємності. Подібні термодинамічні явища розкривають важливий момент під час вимірювання параметрів у циклі: значна теплопередача вимагає зміни температури, навіть такої незначної як 1 К (в охолоджувачі), коли CO_2 знаходиться в околиці критичної точки.

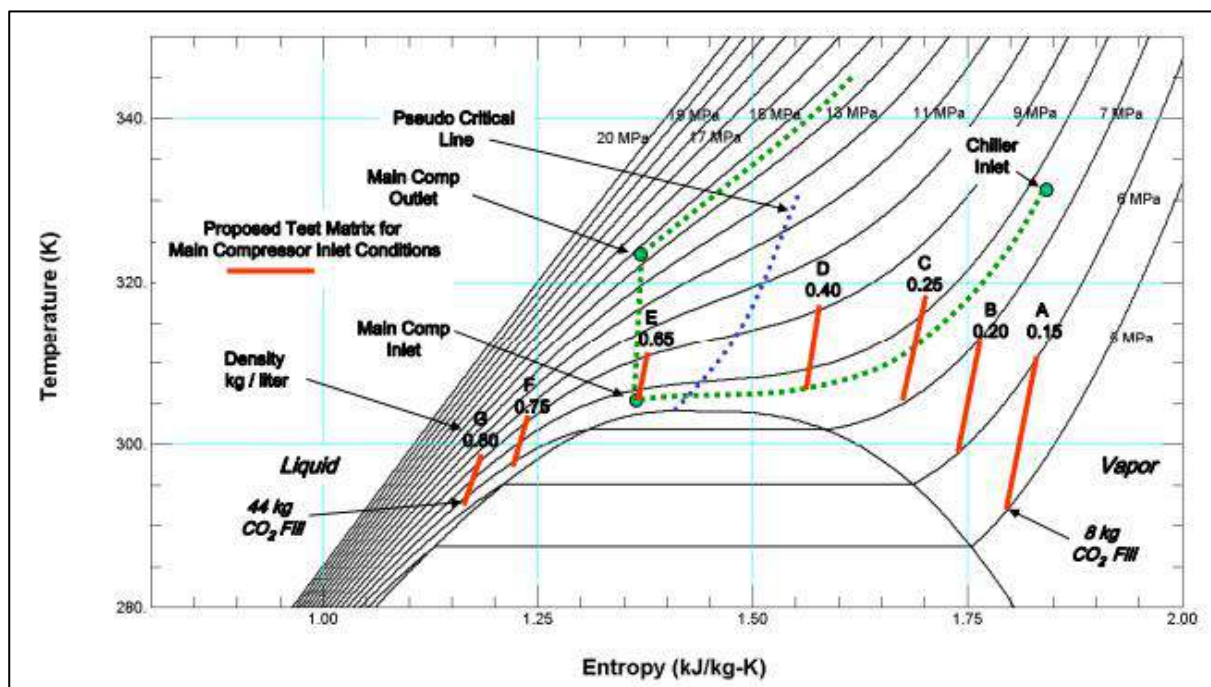


Рис. 2.4. T-S діаграма для циклу S- CO_2

Три частини граничних умов на вході в компресор представлено у звіті [1]:

- близькі до критичної точки (305,3 К, 7690 кПа);
- на лінії насичення з боку слабкої фази (295 К, 7690 кПа);
- на лінії насичення з боку газової фази (295 К, 5000 кПа).

На рис. 6 вони позначені літерами А, Е та F відповідно.

При проведенні експерименту було змінено витрату при фіксованій частоті обертання та вимірюванні температури й тиску на вході та виході, а також

потужності мотору. Частота обертання варіювалася від 10000 об/хв до 65000 об/хв. Отримані в результаті тестових запусків [2] значення температури, тиску й витрати представлено в табл. 2.1.

Крім того, у звіті [3] виділено, що компресійний цикл може бути модернізовано. Процес стиснення S-CO₂, описаний вище, був модифікований для забезпечення повного представлення конденсаційного циклу Брайтона S-CO₂. Це було досягнуто шляхом додавання другого теплообмінника між входом до компресора та входом до дросельного клапана, як показано на рис. 2.5. Цей теплообмінник призначений для додавання теплової енергії. Вторинна (корпусна) сторона теплообмінника з'єднана з водяним контуром.

Таблиця 2.1. Експериментальні значення основних параметрів робочого циклу

Частота обертання, об/хв	Повна температура на вході, К	Повний тиск на вході, бар	Масові витрати на вході, кг/с	Статичний тиск на виході, бар	Повиний тиск на виході, бар
10000	305,5	76,76	0,454	79,79	79,79
20000	305,5	76,76	0,771	78,54	80,69
28000	305,5	76,76	1,134	82,11	85,33
39000	305,6	77,11	1,451	85,68	92,82
49000	306,3	78,54	1,816	94,25	106,39
55000	306,4	78,9	2,043	99,96	113,53
56000	306,6	78,26	2,088	101,04	114,96
60000	306,9	79,97	2,225	102,11	121,39
64900	307,9	82,11	2,406	108,53	129,24

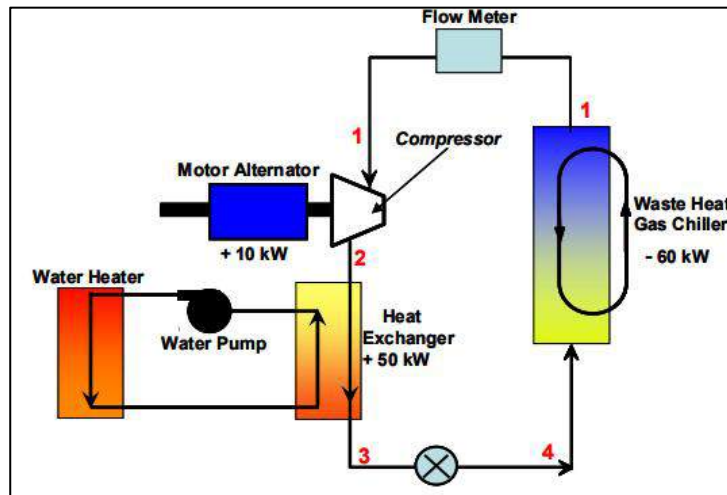


Рис. 2.5. Удосконалений компресорний контур

У цьому контурі, в одному з варіантів експериментів, до компресора надходить рідкий CO_2 . Термодинамічний процес у контурі з експерименту, зображений на рис. 2.6, починається з входу до компресора, де робоче тіло має високий рівень густини (точка 1), далі робоче тіло стискається вздовж лінії практично постійної ентропії (точки 1-2), далі проходить через клапан, викликаючи майже ізоентальпійне падіння тиску нижче кривої насичення (точки 2-3) та перед охолодженням у охолоджувачі повертається назад у докритичну область (точки 3-1).

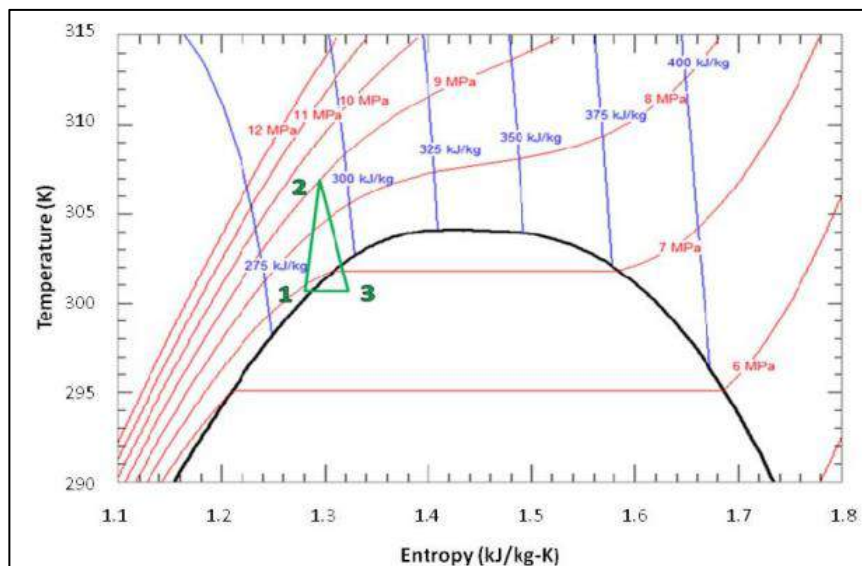


Рис. 2.6. T-S діаграма вдосконаленого компресорного циклу

Перехід з точки 3 до 1 знаходиться в двофазній області. Крім того, сам цикл практично повністю знаходиться в області рідкої фази. Рівняння стану Анг'є-Редліха-Квонга не може описати термодинамічні параметри CO_2 з достатньою

точністю. Похибка між експериментальними даними та значеннями, визначеними з рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, зростає при наближенні до навколокритичної області при визначенні об'ємів газової фази. Похибка визначення об'ємів рідкої фази складає від 7% до 30% при наближенні до критичної точки CO₂. Така значна розбіжність у результатах при визначенні об'ємів має безпосередній вплив на визначення інших термодинамічних параметрів.

2.2 Вимірювальні прилади

Тиск вимірювався за допомогою датчика тиску Honeywell FP2000. FP2000 є налаштовуваним датчиком перепаду тиску, що дозволяє вибрати конфігурацію, яка найкраще відповідає потребам експерименту (рис. 2.7).

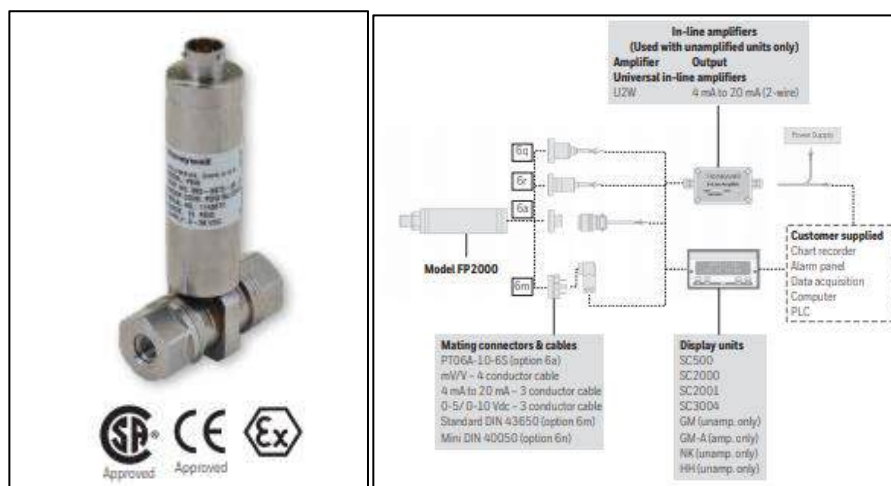


Рис. 2.7. Загальний вигляд та схематичне зображення датчика Honeywell FP2000

Серія Honeywell FP5000 є п'єзорезистивним кремнієвим датчиком тиску з ізоляцією від середовища, що пропонує кілька варіантів виведення результатів у зазначеному діапазоні тиску та температурному діапазоні.

Він компенсує зміщення датчика, чутливість, температурні ефекти та нелінійність, що забезпечує покращену термічну стабільність і точність. Частини, що змочуються, вироблені з нержавіючої сталі Hastelloy® C276 і 316L, забезпечують стійкість до абразивних і корозійних середовищ.

Датчик вимірює тиск у рідкій, газовій та двофазній областях. Датчик тиску складається з первинного перетворювача тиску, до складу якого входить чутливий

елемент - приймач тиску, схеми вторинної обробки сигналу та пристрою виведення інформаційного сигналу. Принцип перетворення тиску на електричний сигнал - п'єзоелектричний.

Функції та особливості:

- Діапазон тиску від 10 дюймів H_2O [0.36 фунтів на кв. дюйм] до 5000 фунтів на кв. дюйм.
- Типи манометричного, абсолютного, вакуумного, барометричного, складового та диференціального тиску у вологому / вологому стані.
- Підвищена точність до 0.1% FSS BFSL.
- Декілька типів виходів: від 0 до 5 В постійного струму, від 0 до 10 В постійного струму, від 4 мА до 20 мА, $5\text{ В} \pm 5\text{ В}$ постійного струму, $12\text{ мА} \pm 8\text{ мА}$.
- Різні варіанти підключення до електромережі та тиску.
- Регулювання нуля за допомогою потенціометра.
- Діапазон робочих температур від -40°C до 125°C [від -40°F до 250°F].
- Декілька діапазонів температур компенсації.
- Швидший відгук і більш висока роздільна здатність.
- Повністю аналоговий сигнальний тракт зі зниженим рівнем шуму забезпечує постійну вихідну роздільну здатність.

Коріолісовий вимірювач масових витрат Micromotion CMF100M використовується для вимірювання густини на вході до компресора. Коріолісові вимірювачі масових витрат - це прилади, які використовують ефект Коріоліса для виміру масових витрат рідин та газів. Принцип дії заснований на змінах фази механічних коливань U-подібних трубок, якими рухається робоче тіло. Зсув фаз пропорційний до величини масової витрати. Потік з певною масою, що рухається через вхідні гілки витратомірних трубок, утворює коріолісову силу, яка чинить опір коливанню витратомірних трубок (рис. 2.8).

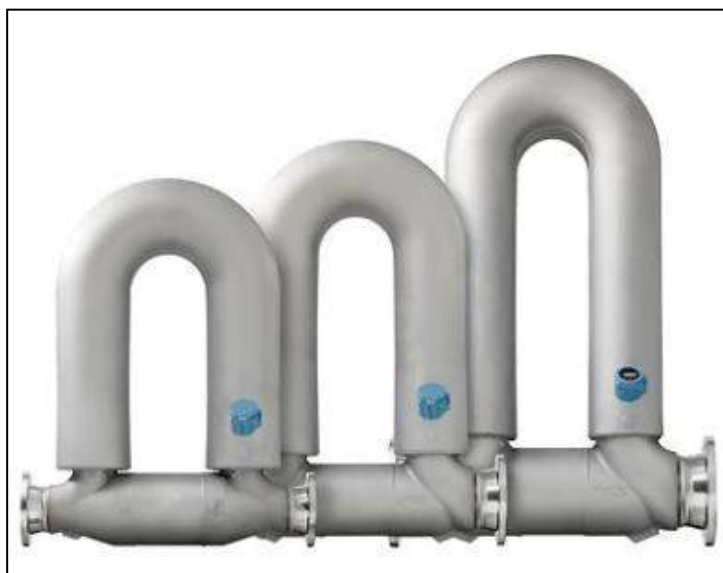


Рис. 2.8. Коріолісовий витратомір

Характеристики витратоміра:

- Похибка вимірювань може змінюватись в залежності від масової витрати та не залежить від робочої температури, тиску та складу середовища. Тим не менш, величина перепаду тиску на сенсорі залежить від робочої температури, тиску та складу середовища.

- Технічні характеристики та можливості приладу залежать від конкретної моделі. Деякі моделі пропонуються в обмеженій кількості варіантів виконання.

- Літера в кінці коду базової моделі (наприклад, CMF100M) відповідає матеріалу деталей, що контактують з робочим середовищем та (або) умовам експлуатації: M = нержавіюча сталь 316L; L = нержавіюча сталь 304L, H = нікелевий сплав C22, P = високий тиск, A = нержавіюча сталь 316L (висока температура), B = нікелевий сплав C22 (висока температура).

Експлуатаційні характеристики:

- Робоче середовище: вода з температурою від 20 до 25 °C (від 68 до 77 °F) та тиском від 1 до 2 бар (14.5 до 29 фунтів/кв. дюйм)

- Повітря та природний газ з температурою від 20 до 25 °C та тиском від 34 до 100 бар (від 68 до 77 °F та від 500 до 1450 фунтів/кв. дюйм)

- Точність вимірювань перевіряється з використанням найбільш поширених у галузі атестованих калібрувальних стендів при дотриманні вимог стандарту ISO 17025/IEC 17025.

- Для всіх моделей максимальна густина 5000 кг/м³ (5 г/см³).

Для підтримки постійної температури на вході до компресора використовується ПД-регулятор. Контролер температури (рис. 2.9) приймає вхід від датчика температури та має вихід, який підключений до елемента управління, такого як нагрівач або вентилятор.

Для точного контролю температури без активного втручання оператора система контролю температури спирається на контролер, який може бути датчиком температури, таким як термопара або термометр опору, у якості вхідних даних. Він порівнює фактичну температуру з необхідною контрольною температурою або заданими значеннями та забезпечує виведення на елемент керування.

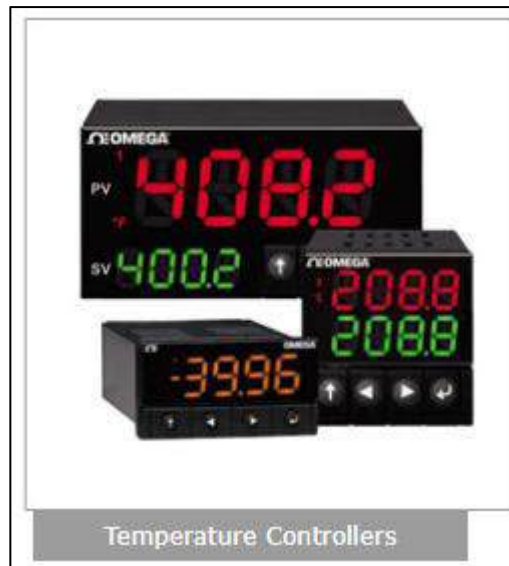


Рис. 2.9. Контролер температури

Основні характеристики:

- можна вибрати один з режимів роботи: P, PI, PD, PID або просто ON-OFF;
- два релейних керуючих виходу «OUT» і «ALARM»;
- режим "Нагрів" і "Охолодження" ("Heating" і "Cooling");
- два релейних керуючих виходу «OUT» і «ALARM»;
- режим "Нагрів" і "Охолодження" ("Heating" і "Cooling");
- можливість автоматичного підбору параметрів ПД регулювання;
- широкий вибір датчиків температури для підключення до терморегулятора - Т/С (ТЖК, ТХА, ТМКн, ТПП) (J, K, T, S, R) або Pt100;
- автоматичне скорочення "Перерегулювання" в режимі ПД;

- вбудована функція "Anti-windup" - компенсація інтегрального ефекту насичення;
- можливість вибору абсолютного, відносного або смугового значення для ALARM контакту;
- можливість установки верхнього і нижнього рівняння для SET і ALARM;
- можливість установки затримки включення (ON-delay) для режиму Охолодження (COOLING mode);
- на дисплеї контролера показується два значення температури - 4 знаки 7 сегментів встановлене значення температури і 4 знаки 7 сегментів поточне значення температури, яку вимірює регулятор;
- вбудована компенсація впливу температури холодного підключення датчиків типу T/C (cold-junction compensation);
- лінійна компенсація для датчиків температури типу Pt100 приєднаних до терморегулятора - 0...50°C;
- можливість завдання величини зміщення температури вимірювання для термоконтроллера.

2.3 Експериментальне дослідження стискання в компресорному циклі

Було проведено три серії експериментів для дослідження процесу стискання в компресорному циклі.

1. Перша серія експериментів досліджувала стискання рідкого CO₂ з використанням компресора S-CO₂.
2. Друга серія експериментів присвячена використанню компресора в широкій області: умови на вході в компресор змінювалися від чистого газу до чистої рідини.
3. Для третьої серії експериментів були внесені конструкційні зміни до циклу: додано нагрівач для створення двофазної області під час роботи циклу.

Кожен із цих трьох експериментів коротко викладено нижче.

Для першої серії експериментів CO₂ на вході має властивості рідини, тому для цього випадку проводилися дослідження можливості роботи циклу S-CO₂ з рідким CO₂ поблизу критичної точки. Температура на вході - 305,4 К, тиск 7687 кПа та

густина 0,579 кг/л. Оскільки цикл призначено для роботи з високою температурою та тиском на вході компресора, перша серія випробувань може виконуватися без конструкційних змін у циклі. У цих тестах густина рідини CO₂ на вході до компресора склала 0,793 кг/л.

2. Для іншої серії експериментів, через те, що газова та рідка фази розрізняються за густиною в 2-3 рази, виникло питання про здатність відділяти рідину від парової фази без зміни конструкції охолоджувача. Однак попереднє випробування показало, що охолоджувач, хоча він і не був спеціально сконструйований як конденсатор, був повністю здатний подавати рідкий CO₂ до компресора для випробування в докритичних умовах. Таким чином, при призначенні цієї серії випробувань відбувалися спостереження за густиною рідини або газу (залежно від фази) на виході з охолоджувача, в той час як його граничні умови на вході були однофазним газом або двофазною сумішшю.

3. Модифікований цикл з використанням нагрівача для підвищення ентальпії рідкого CO₂ після стиснення. Експерименти проводилися при температурі на вході до компресора 301- 302 К і тиску 6900 – 7300 кПа. Через збільшену ентальпію виміряні результати показали, що CO₂, який надходить до охолоджувача, був насиченою парою, але на виході з охолоджувача він був насиченою рідиною. Це підтверджує здатність охолоджувача конденсувати CO₂ в цих умовах та здатність компресора перекачувати рідкий CO₂. Ці результати випробувань були виконані з досить невеликим переохолодженням нижче критичної точки, тому різниця в густині між рідиною і парою невелика.

Попередні випробування показали, що головний компресор S-CO₂ може працювати в нестандартних умовах, у тому числі на парових та рідких сторонах лінії насичення. Ще одна серія випробувань показує, що головний компресор S-CO₂ може ефективно стискувати двофазні суміші CO₂. Спочатку ці тести були проведені для визначення критичної точки CO₂ з використанням компресорного циклу Sandia та за допомогою вимірювальних приладів. Здатність компресора S-CO₂ працювати в таких широких умовах була зумовлена двома факторами: по-перше, тому що компресор є радіальним (відцентровим) компресором, а не осьовим. Відомо, що

радіальні компресори працюють краще в широкому діапазоні зміни густини робочого тіла. Іншою причиною є мале відношення густини між рідким CO₂ та газовим CO₂ при кімнатній температурі (коефіцієнт 3:1 для CO₂ відповідно з 1000:1 для води). Експерименти почалися з якісного дослідження областей поблизу відомого критичного тиску (7,39 МПа). Ураховуючи дані про температуру й густину вздовж лінії постійного тиску поблизу критичної точки, отримані криві (ізотерми) дають близьку оцінку визначення того, чи досягло робоче тіло надкритичного стану. При цьому використовується той факт, що нижчі за критичні значення густини CO₂ повинні опинитися в двофазній області (під кривою насичення), де при незмінному тиску для кожної температури змінюється густина (Рис. 2.7). При тиску вище критичного ізотерми проходять над «куполлом» лінії насичення, не демонструючи такої «плоскої» поведінки.

Процес проведення експерименту був наступним: цикл був заповнений рідким CO₂ з високою густиною та з необхідним тиском. За допомогою ПІД-регулятора в циклі поступово підвищувалася температура. У міру підвищення температури, тиск рідкої та газової фази також підвищувався. Далі CO₂ витравлювався через клапан для підтримки постійного тиску в циклі, доки температура продовжувала зростати. Частота обертання компресора була незмінною. Дані випробування, отримані при 7,31 МПа, показано нижче на рис. 2.10.

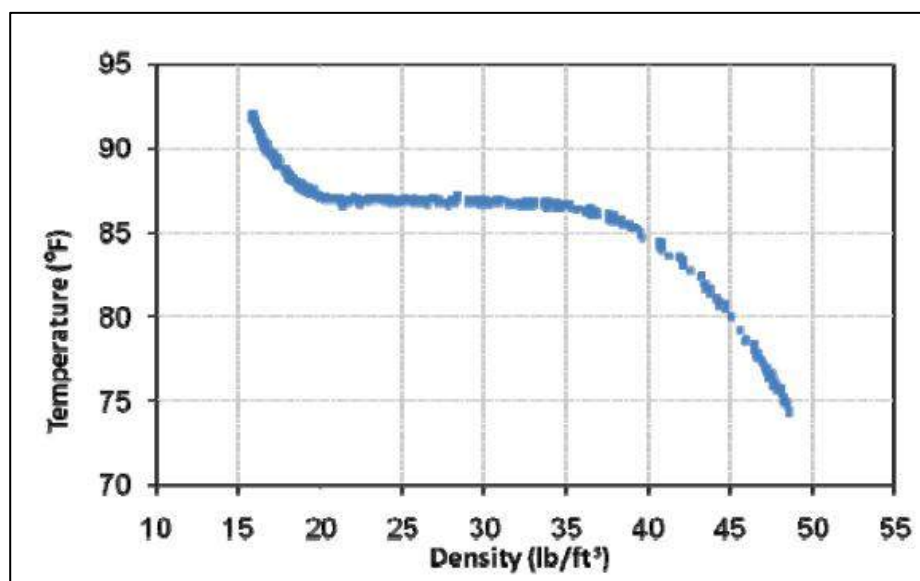


Рис. 2.10. Експериментальна температура та густина при постійному тиску
7,31 МПа

Дані були відфільтровані при подальшій обробці, щоб унеможливити точки на відстані більше 1 фунта на квадратний дюйм від необхідного тиску. Примітною особливістю кривої на рис. 2.10 є плоска область між рідкою фазою з високою густиною та газовою фазою з малою густиною. Це явне підтвердження того, що двофазні умови можливі за 1060 фунтів на квадратний дюйм (7,31 МПа), та що створені під час експерименту умови знаходяться нижче критичної точки.

Аналогічні дані були виміряні з іншими тисками, щоб сформувати сімейство ізотерм (рис. 2.11). Отримані в результаті експерименту ізотерми мають у межах заданого збіг з даними з NIST RefPROP, що є доказом точного вимірювання витратоміром масової витрати та густини в двофазній області. Однак, незважаючи на задовільні результати, цей метод є досить складним і має ряд похибок у визначенні істинної критичної точки CO₂.

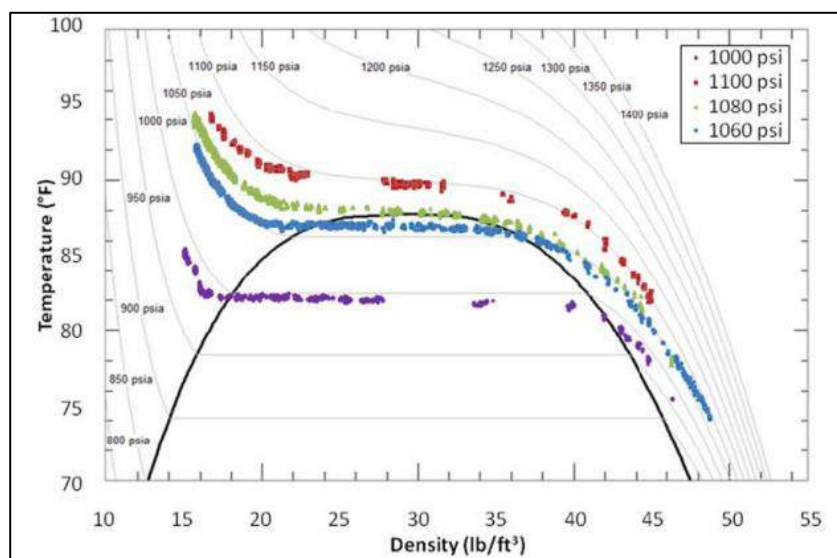


Рис. 2.11. Порівняння T-Rho кривих при різних величинах постійного тиску поблизу критичної точки

В експериментах з модифікованим циклом (з додаванням нагрівача) було досліджено роботу компресора з рідким CO₂ на вході, потім CO₂ був нагрітий приблизно на три градуси шляхом додавання 50 кВт, а потім його було розширено через регульоване сопло для зниження тиску та перетворено з насиченої пари в охолоджену; двофазна суміш CO₂ подавалась в охолоджувач. Охолоджувач видаляє надлишок тепла від нагрівача для подачі рідкого CO₂ до компресора. Поблизу

критичної точки теплоємність CO_2 дуже велика, тому за умов випробування 1,4 кг/с нагрівач був здатний підвищити температуру CO_2 лише на 3 К.

Рис. 2.12 показує типову двохвилинну картину зміни параметрів під час одного з цих експериментів. Три графіки на цьому рисунку (А, В і С) показують час вимірювання та залежні від нього тиск, температуру, масову витрату, густину та частоти обертання. Під час цього експерименту частота обертання ротора компресора збільшилася до 40000 об/хв і підтримувалася близько до двох хвилин. Тиск і температура підтримувалися майже постійними під час експерименту, хоча спостерігалось невелике підвищення обох параметрів. CO_2 на вході до компресора утримувався при 303 К та 7 МПа з витратою 1,5 кг/с. Тиск на виході був 9 МПа, що дає коефіцієнт підвищення тиску 1,27. Дані, отримані протягом 30 секунд експерименту (рис. 2.13), нанесено на Т-S діаграму (рис. 2.12, 2.14).

Тиск вимірювався за допомогою датчика тиску Honeywell FP2000. Коріолісовий витратомір Micromotion використовувався для вимірювання на вході до компресора. Ентропія розраховувалася за допомогою бази даних NIST Refprop. Ентропія на виході з компресора та на виході з нагрівача розраховувалася за значеннями вимірюваної температури та тиску. Цей метод також використано для розрахунку ентропії на виході з клапана у випадку (А). Це можливо тільки тому, що ці точки знаходяться далеко за межами лінії насичення. Для експериментів (В) та (С) значення ентропії при використанні методу виміру температури та тиску також показані для точки виходу з клапана.

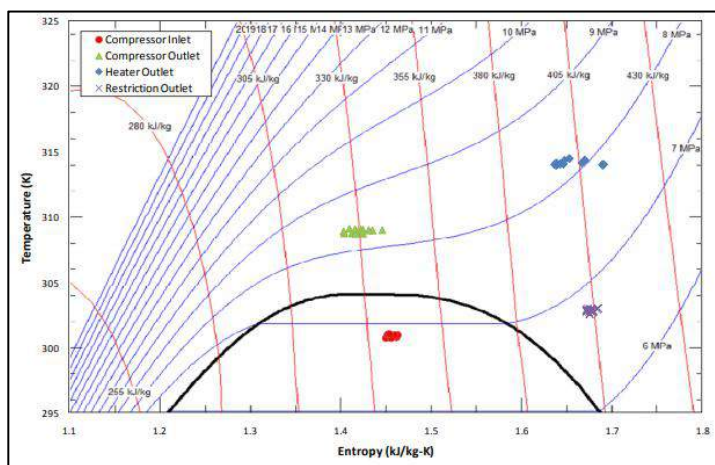


Рис. 2.12. Т-S діаграма для S- CO_2 компресорного циклу для двофазної області CO_2 на вході (296 К)

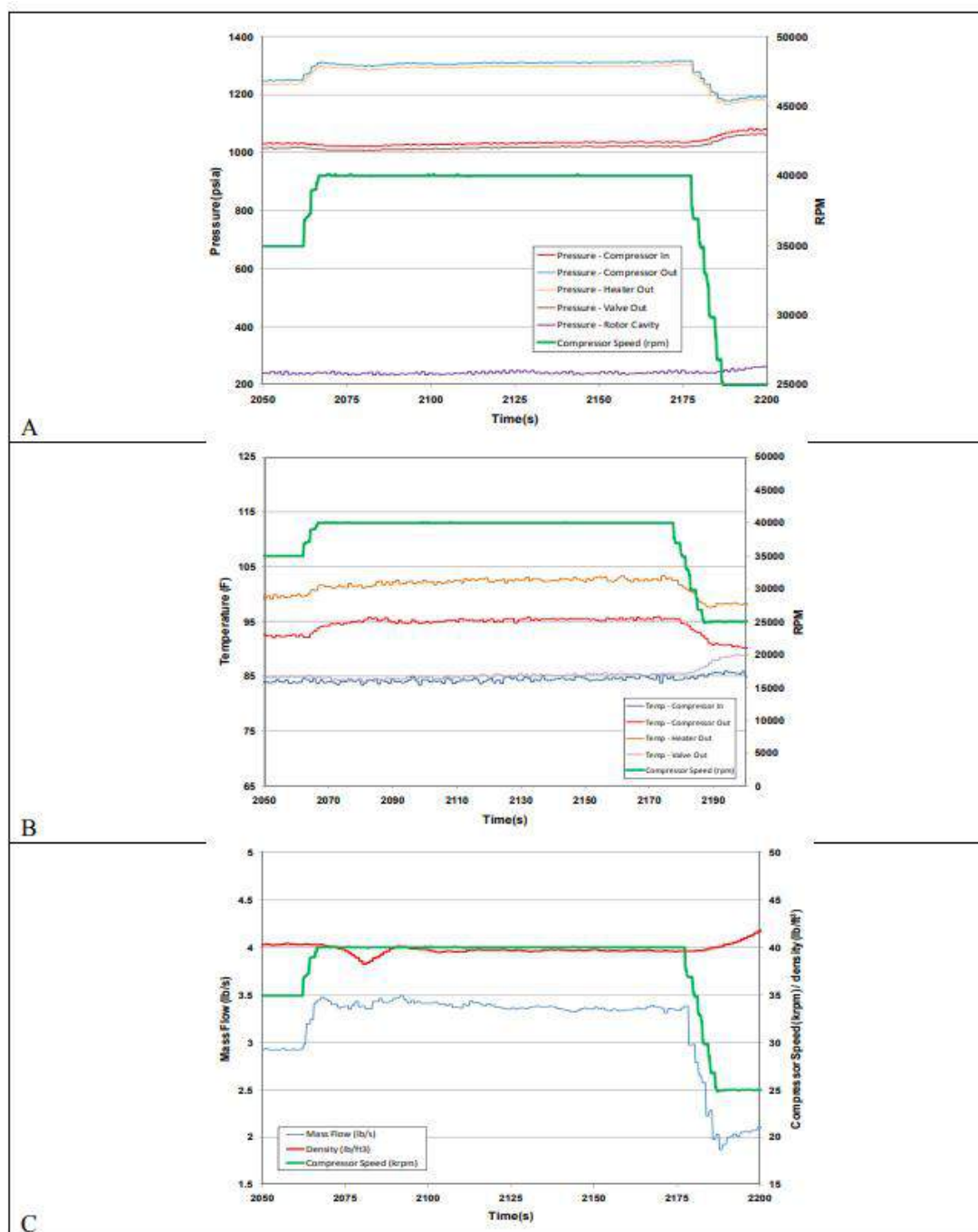


Рис. 2.13. Виміряні значення тиску, температури, масової витрати, густини та частоти обертання компресора під час експерименту

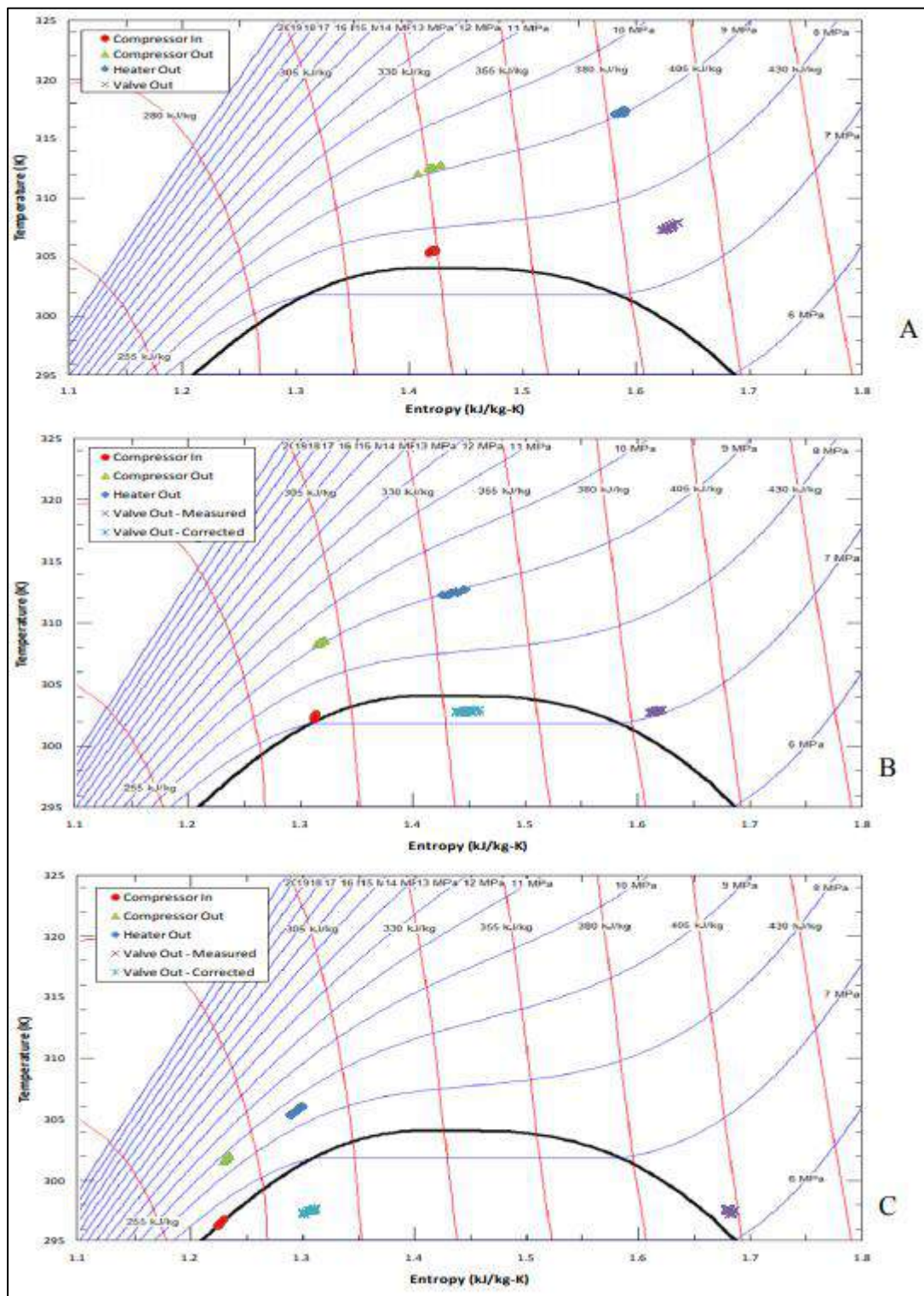


Рис. 2.14. T-S діаграма S-CO₂ компресорного циклу для: А – для надкритичного CO₂ на вході, В - для рідкого CO₂ на вході біля критичної точки (303K), С - для рідкого CO₂ на вході на лінії насичення (296K)

2.4 Висновки до другого розділу

1. Модифіковано обладнання, що реалізує цикл стиснення S-CO₂ для забезпечення повного представлення конденсаційного циклу Брайтона S-CO₂. Це було досягнуто шляхом додавання другого теплообмінника між виходом з компресора та входом до дросельного клапана CO₂. Цей теплообмінник призначено для додавання 50 кВт теплової енергії CO₂. Вторинна (корпусна) сторона теплообмінника з'єднана з водяним циклом.

2. У одному з варіантів проведених експериментів, до компресора надходить рідкий CO₂. Цикл у цих експериментах реалізується з високою густиною робочого тіла на вході до компресора. Далі CO₂ стискається вздовж лінії практично постійної ентропії, проходить через клапан, викликаючи майже ізоентальпійне падіння тиску нижче лінії насичення і перед охолодженням у охолоджувачі потрапляє назад у докритичну область.

3. Перехід з точки 3 до 1 знаходиться в двофазній області. Крім того, сам цикл практично повністю знаходиться в рідкій фазі. Рівняння стану Анг'є-Редліха-Квонг не може описати термодинамічні параметри CO₂ в усіх фазах, які виникають у проведеній серії експериментів.

4. Для подальших розрахунків необхідно модифікувати рівняння стану, яке, можливо, може ґрунтуватися на масштабній теорії, а також звернути увагу на емпіричні методи визначення деяких термодинамічних параметрів.

5. Описано перелік вимірювальних приладів, які використовувалися для вимірювання параметрів відцентрового компресора в ході експерименту.

Результати, отримані у третьому розділі, опубліковано в роботі [4].

2.5 Література до другого розділу

- [1] Wright, S., Parma, Jr, E., Suo-Anttila, A., Al Rashdan, A., Tsvetkov, P., Vernon, M., Fleming, D., & Rochau, G. (2011). Supercritical CO₂ Direct Cycle Gas Fast Reactor (SC-GFR) Concept. <https://doi.org/10.2172/1013226>
- [2] Wright, S., Conboy, T., Radel, R., & Rochau, G. (2011). Modeling and Experimental Results for Condensing Supercritical CO₂ Power Cycles. <https://doi.org/10.2172/1030354>
- [3] Rapp, L. (2022). Sandia National Laboratories: From Laboratory To Large-Scale SCO₂ Brayton Cycle Development. *Proposed For Presentation At The 7th International Sco2 Power Cycles Symposium Held February 21-24, 2022 In San Antonio, Texas United States Of America*. <https://doi.org/10.2172/2001784>
- [4] Vorobiova, Hanna & Dolmatov, Dmytro & Fesenko, Kseniia & Sysoiev, Iurii & Dehtiarov, Oleh & Ivashchenko, Maryna. (2024). Effect Detection Of Using A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State On The Calculation Of Carbon Dioxide Flow In A Centrifugal Compressor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2. 54-65. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.

РОЗДІЛ 3. 1D/2D- ТА 3D- МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У ВІДЦЕНТРОВОМУ КОМПРЕСОРІ

Відцентровий компресор зі звіту Sandia National Laboratories був змодельований у середовищі 1D AxSTREAM®. За робоче тіло обрано табличний флюїд CO₂, властивості якого взято з NIST RefPROP. Для подальшого розрахунку 3D AxCFD™ сформовано робоче тіло, яке описує модель рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є. Ця модель добре описує властивості робочого тіла в надкритичній та газовій областях, але недостатньо точна для рідкої, двофазної та в області навколо критичної точки. Оригінальне рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є можна використовувати для моделювання потоку у відцентровому компресорі з граничними умовами для проектної точки, але математична модель рівняння стану неспроможна моделювати фазовий перехід від рідкого стану до надкритичного або від двофазного стану до надкритичного в регіоні, дотичному до критичної точки, з помірною похибкою (не більше 5%) у розрахунках параметрів потоку в компресорі.

3.1 1D/2D математичне моделювання процесів у відцентровому компресорі

1D/2D солвер у AxSTREAM® є ітераційним. Він призначений для надійного та швидкого пошуку коренів великих і складних систем нелінійних рівнянь. Для цього використовується великий набір контрольних параметрів. Їх можна розділити на 2 категорії: параметри контролю збіжності рівнянь і параметри контролю витрат.

Контроль збіжності рівнянь: AxSTREAM® розв'язує нелінійну систему рівнянь за допомогою «методу мінімізації суми квадратів залишків» – фактично методу нелінійного програмування для пошуку екстремуму багатопараметричної функції в просторі розмірності N (кількість невідомих у рівняннях системи). Використовується широко відомий метод спряжених градієнтів, який включає два етапи: визначення напрямку пошуку (розрахованого на основі попередніх напрямків – градієнтів) і пошук одновимірного мінімуму залишків. Коли одновимірний та N -вимірний пошук завершено, тоді досягнуто екстремуму, тобто похідна (градієнт)

близька до нуля, а кроки пошуку також близькі до нуля (не перебільшують встановлену межу точності).

Сполучений градієнтний метод пошуку. Існує багато спеціальних чисельних методів для одновимірного пошуку екстремуму. AxSTREAM® підтримує пару з них: пряму схему, метод золотого перерізу та метод квадратичної апроксимації Девіса-Свона-Кемпі-Пауелла (скорочено DSC-Powell). Останній є більш ефективним, але може витратити стійкість, якщо функція недостатньо плавна. Для реалізації методу сполученого градієнтного пошуку передбачено три різні алгоритми. Для розрахунку компресорів рекомендується використовувати пряму схему або золотий перетин. Можна використовувати DSC-Powell, однак у випадку компресорів отримання збіжності рішення буде складною процедурою. Пряма схема забезпечує більш швидку конвергенцію в порівнянні з золотим перетином, особливо якщо тиск вибрано як вихідну граничну умову. Однак пряма схема може не збігатися, якщо число Маха близько до 1.

Режим розрахунку витрат. Витрати можуть бути розраховані всередині алгоритму пошуку коренів або у зовнішньому циклі спільно з розробкою ліній току. Для розрахунків витрат на основі різних турбомашин передбачено три різних режими. Основна відмінність між цими параметрами полягає в послідовності виконання циклу:

- а. внутрішня петля;
- б. зовнішня петля;
- в. комбінована петля.

Внутрішня петля - формує потік уздовж тракту: кінематика, термодинаміка та витрати розраховуються для кожного елемента в машині, а масова витрата потоку між елементами підтримується постійною.

Зовнішня петля - витрати та фізичні параметри (такі як потужність, масова витрата, тиск, ентальпія тощо) визначаються та розраховуються на вході чи виході (залежно від завдання) з урахуванням результатів розрахунків внутрішньої петлі.

Комбінована петля - включає розрахунок витрат і параметрів на основі внутрішньої петлі та зовнішньої петлі.

Налаштування внутрішньої петлі є кращим для розрахунку компресорів, щоб отримати хорошу збіжність рішень.

На рис. 3.1 показана схема петель моделі розрахунку витрат.

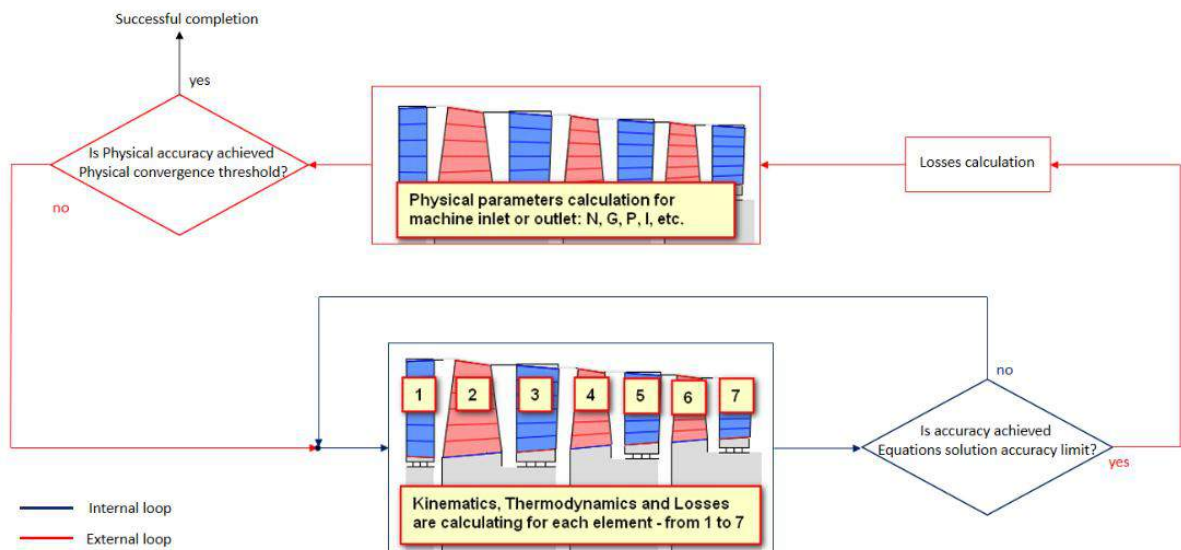


Рис. 3.1. Схема моделі розрахунку витрат

Основні геометричні розміри компресора були взяті з [1] (рис. 3.2, 3.3). Компресор для валідації було прийнято моделювати з такими граничними умовами:

- повна температура на вході: 306.4 K;
- повний тиск на вході: 78.9 бар;
- повний тиск на виході: 113.53 бар;
- масова витрата: 2.043 кг/с;
- частота обертання ротора: 55000 об/хв.

Файл, що описує властивості робочого тіла CO₂, було створено в програмі Fluid Designer™, яка використовує дані та параметри робочого тіла з NIST RefPROP. Створення та 1D розрахунок компресора виконано в програмі AxSTREAM™.[2] - [5].

IMPELLER GEOMETRY	
Number of full blades	6
Number of splitter blades	6
Impeller inlet radius at hub	2.537585 mm
Impeller inlet radius at shroud	9.372047 mm
Impeller exit radius	18.68170 mm
Blade angle of the impeller leading edge at hub	17.88 °
Blade angle of the impeller leading edge at mean radius	37.13 °
Blade angle of the impeller leading edge at shroud	50.00 °
Blade angle of the impeller trailing edge	-50.00 ° (backward)
Angle between streamlines and shaft at impeller inlet	0 °
Angle between streamlines and shaft at impeller exit	90 °
Full blade length	25.0 mm
Splitter blade length	12.5 mm
Axial length of the impeller	15.9 mm
Blade thickness at impeller leading edge	0.762 mm
Blade thickness at impeller trailing edge	0.762 mm
Blade height at impeller leading edge	1.7 mm
Clearance gap at impeller tip	0.254 mm
VANED DIFFUSER GEOMETRY	
Number of vanes	17
Diffuser inlet radius	18.5 mm
Diffuser exit radius	26.0 mm
Blade angle at diffuser inlet	71.50 °
Blade angle at diffuser exit	42.44 °
Blade height at diffuser inlet	1.8 mm
Blade height at diffuser exit	1.8 mm
Diffuser channel length	10.6 mm
Blade thickness at diffuser inlet	0.0 mm
Blade thickness at diffuser exit	3.35 mm

Рис. 3.2. Основні геометричні розміри компресора

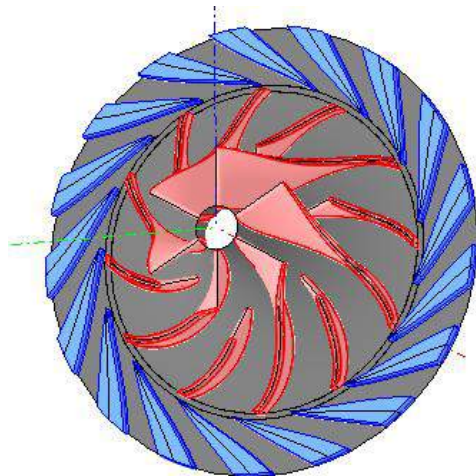


Рис. 3.3. Експериментальний зразок та компресор, спроектований у AxSTREAM™

Деяка неточність була допущена при описі діаметра на вході до статора, тому цей розмір був обраний з урахуванням установки безлопатевого дифузора між ротором та статором.

У результаті розрахунку середньої лінії 1D, проведеного в AxSTREAM™, отримано такі параметри (табл. 3.1, рис. 3.4, 3.5):

Таблиця 3.1. Результати розрахунку середньої лінії у 1D просторі та результати експерименту

Параметри	Одиниці вимірювання	1D AxSTREAM	Результати експерименту
Повний тиск на вході	бар	78.9	
Повна температура на вході	К	306.4	
Статичний тиск на виході з ротора	бар	99.96	
Статичний тиск на виході з компресора	бар	113.65	
Ступінь стиснення тиску	-	1.44	
ККД	-	0.724	0.628
Масові витрати	кг/с	2.043	

Для ротора та статора профільні (первинні) витрати описано по моделі Анг'є (рис. 3.6).

5	om	total pressure loss factor
6	om_sf	skin friction loss factor
7	om_inc	incidence loss factor
8	om_bl	blade loading loss factor
9	om_lam	flow distortion loss factor
10	om_cl	tip clearance loss factor
11	om_hs	hub-to-shroud loading loss factor
12	om_cr	supercritical flow loss factor
13	om_mix	separated flow mix loss factor
14	om_ch	choke loss factor
15	om_sh	shock loss factor
16	om_dif	diffusion loss factor

Рис. 3.6. Витрати в моделі ротора

На додаток до загальної (профільної) витрати тиску ротор розраховується також на витрату на дискове тертя та на перетікання через зазор (рис. 3.7).

wl_r	windage loss ratio
tsll_r	tip/shroud leakage loss ratio

Рис. 3.7. Додаткові розрахунки витрат у роторі

Список профільних витрат для статора (рис. 3.8):

om	total pressure loss factor
om_sf	skin friction loss factor
om_inc	incidence loss factor
om_mix	separated flow mix loss factor
om_ch	choke loss factor
om_sh	shock loss factor

Рис. 3.8. Профільні витрати для моделі статора

Межа для профільних витрат Limit: цей параметр дозволяє вказати мінімальну межу для коефіцієнта швидкості (Los), який не може бути нижчим за вказану межу профільних витрат. Якщо солвер нараховує значення Los , більше, ніж зазначена межа ($Los < Limit$), коефіцієнту Los автоматично надається первинне (профільне) граничне значення витрат. Це може допомогти зі збіжністю розрахунку, але не дуже фізично, тому що реальні витрати будуть перевищувати автоматично зазначену межу. З іншого боку, у випадку моделі з фіксованим коефіцієнтом витрата Los дорівнює $Limit$.

Масштаб первинних моделей у витраті Loss scale: значення Loss додається до масштабного врахування коефіцієнтів. Ця опція використовується для калібрування моделей витрат.

Вторинні витрати у відцентровому компресорі - це витрати від змішування потоку та від удару потоку. У відцентрових компресорах ці витрати є невід'ємною частиною первинних витрат, як частини загальних витрат системи витрат тиску.

Рекомендовані моделі витрат від відхилення потоку зведено у табл. 3.2:

Таблиця 3.2. Рекомендовані моделі витрат для відцентрового компресора

Ротор	AxS RC Wiesner
Статор	AxS RC від Howell
Дисверлер	AxS IGV Aungier
ВНА	AxS default

Межа кута відхилення, devLimit, є верхньою межею, яка розраховується з обраною моделлю відхилення. Кут відхилення не може перевищувати межу. Нульове значення для цієї межі означає обмеження кута відхилення. Якщо кут відхилення більший за межу, $\alpha = \text{devLimit}$. Межа кута відхилення активна, якщо в якості моделі витрат на відхилення потоку вибрано fixed loss factor.

Масштабний коефіцієнт кута відхилення devAngle scale: значення, введене в поле, діє як коефіцієнт, який масштабує кут відхилення, розрахований за допомогою моделі. Розрахований солверем кут відхилення множиться на шкалу кута відхилення. Коригування шкали кута відхилення іноді потрібне для узгодження з експериментальними даними.

Модель загромождження каналу враховує аеродинамічне загромождження, і загальна площа каналу зменшується на товщину прикордонного шару.

На даний момент при розрахунку всіх компонентів відцентрових компресорів доступний тільки "фіксований коефіцієнт витрат". Значення загромождження каналу фіксоване, тому задання межі для моделі загромождження та масштабного коефіцієнта не має сенсу.

Рівняння, що використовуються для розрахунку витрат, описані нижче [6].

Загальний коефіцієнт витрати тиску

Загальні витрати компонентів є функціями геометрії, швидкості, температури та тиску:

$$P_{rel_out} = P_{rel_out} - f_c \cdot (P_{rel_in} - p_{s_in}) \cdot \sum om_i, \quad (3.1)$$

$$om_i = \frac{P_{rel_out} - f_c \cdot (P_{rel_in} - p_{s_in})}{P_{rel_out}}, \quad (3.2)$$

$$om = f_c \cdot \sum om_i, \quad (3.3)$$

$$f_c = \frac{P_{rel_out}}{P_{rel_in}} = \frac{(R_{rel_out} - T_{rel_out})}{(R_{rel_in} - T_{rel_in})}, \quad (3.4)$$

$$P_{out} = P_{out} - f_c \cdot (P_{in} - p_{s_in}) \cdot \sum om_i, \quad (3.5)$$

$$om = f_c \cdot \sum om_i. \quad (3.6)$$

Коефіцієнт витрати від поверхневого тертя

Витрата на поверхневе тертя визначається як витрата через сили зсуву на стінках ротора та статора, які здебільшого спричинені турбулентним тертям.

Витрати на поверхневе тертя в робочому колесі можна моделювати як

$$om_{sf} = 4 \cdot Cf \cdot \left(\frac{W'}{W1} \right)^2 \cdot \frac{L_B}{d_h}. \quad (3.7)$$

Для ротора:

$$W' = \frac{(W1 + W2)}{2}, \quad (3.8)$$

$$d_h = \frac{(d_{H1} + d_{H2})}{2}. \quad (3.9)$$

Гідравлічний діаметр на вході визначається як

$$d_{H1} = \frac{4 \cdot A1 \cdot lc1 \cdot \left(\frac{z_b}{z}\right)}{(2 \cdot (A1 + lc1))}. \quad (3.10)$$

Примітка: $z=z_b$, коли ротор не має спліттерних лопаток.

Гідравлічний діаметр на виході визначається як

$$d_{H2} = \frac{4 \cdot A2 \cdot lc2}{(2 \cdot (A2 + lc2))}. \quad (3.11)$$

Площа на вході/виході визначається як (рис. 3.9):

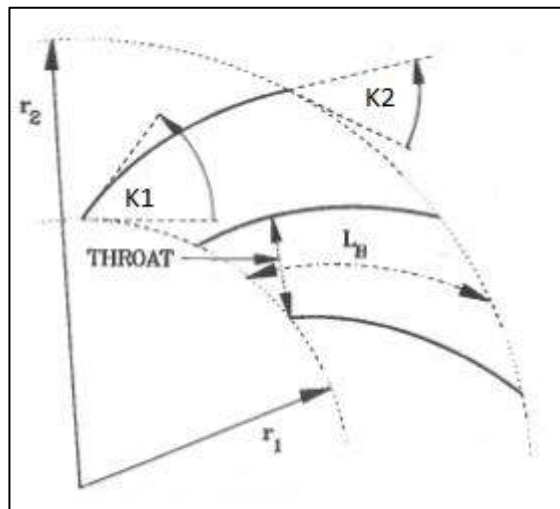


Рис. 3.9. Геометрія лопатки ротора

$$A1 = \frac{\pi \cdot D1m}{z_b} \cdot \sin(K1), \quad (3.12)$$

$$A2 = \frac{\pi \cdot D2m}{z} \cdot \sin(K2). \quad (3.13)$$

Коефіцієнт поверхневого тертя визначається як

$$C_f = C_{fl} + (C_{ft} - C_{fl}) \cdot \left(\frac{Re_d}{2000} - 1 \right). \quad (3.14)$$

Примітка: використовується, коли Re_d лежить між 2000 і 4000.

Коефіцієнт ламінарного тертя визначається як

$$C_{fl} = \frac{16}{Re_d}. \quad (3.15)$$

Коефіцієнт турбулентного тертя визначається як

$$C_{ft} = C_{fts}, \quad (3.16)$$

$$C_{ft} = C_{fts} + (C_{ftr} - C_{fts}) \cdot \left(1 - \frac{60}{Re_e} \right).$$

C_{fts} – коефіцієнт турбулентного тертя, якщо стінка гладка:

$$\frac{1}{\sqrt{4 \cdot C_{fts}}} = -2 \cdot \log_{10} \left[\frac{2.51}{Re_d \cdot \sqrt{4 \cdot C_{fts}}} \right], \quad (3.17)$$

$$C_{fts} = \frac{1}{(1.81 \cdot \lg Re_d - 1.64)^2}.$$

C_{ftr} – для турбулентного потоку по повністю шорсткій поверхні:

$$\frac{1}{\sqrt{4 \cdot C_{ftr}}} = -2 \cdot \log_{10} \left[\frac{e}{3.14 \cdot d_h} \right], \quad (3.18)$$

$$C_{ftr} = \frac{\left(\frac{1}{-2 \cdot \log_{10} \left[\frac{e}{3.14 \cdot d_h} \right]} \right)^2}{4}. \quad (3.19)$$

Для статора:

Моделі для статора подібні до систем рівнянь витрат робочого колеса.

Коефіцієнт тертя визначається як

$$C_f = C_{fl} + (C_{ft} - C_{fl}) \cdot \left(\frac{Re_d}{2000} - 1 \right). \quad (3.20)$$

Коефіцієнт ламінарного тертя визначається як

$$C_{fl} = \frac{16}{Re_d}. \quad (3.21)$$

Коефіцієнт турбулентного тертя визначається як

$$C_{ft} = C_{fts}, \quad (3.22)$$

$$C_{ft} = C_{fts} + (C_{ftr} - C_{fts}) \cdot \left(1 - \frac{60}{Re_e} \right).$$

C_{fts} – коефіцієнт турбулентного тертя, якщо стінка гладка:

$$C_{FTS} = \frac{1}{(1.8 \lg Re_d - 1.64)^2}. \quad (3.23)$$

C_{ftr} – для турбулентного потоку по повністю шорсткій поверхні:

$$C_{FTR} = \frac{1}{\left(2 \cdot \lg \frac{3.71 \cdot d_h}{e} \right)^2}. \quad (3.24)$$

Коефіцієнт витрати від натікання на лопатку

Витрата від натікання на лопатку враховує регулювання потоку фактичного потоку робочого тіла до кута лопатки на вході робочого колеса. Витрати від натікання зростають із збільшенням кута падіння.

$$om_{inc} = 0.8 \cdot \left[1 - \frac{C_{s1}}{(W1 \cdot \sin K1)} \right]^2 + \left[\frac{z_{FB} \cdot tb}{2 \cdot \pi \cdot r1 \cdot \sin (K1)} \right]^2. \quad (3.25)$$

Коефіцієнт витрат при навантаженні на лопатку

Механізм витрати навантаження на лопатку враховує градієнт тиску від лопатки до лопатки.

$$\text{om_bl} = \frac{\left(\frac{\Delta W}{W1}\right)^2}{24}. \quad (3.26)$$

$$\Delta W = \frac{2 \cdot \pi \cdot D2 \cdot U2 \cdot \text{psi}}{z \cdot Lb}. \quad (3.27)$$

$$\text{psi} = \frac{(Cu2 \cdot U2 - Cu1 \cdot U1)}{U2^2}. \quad (3.28)$$

Коефіцієнт витрат турбулентного потоку

Розраховується тільки для ротора:

$$\text{om_lam} = \left[\frac{(\lambda - 1) \cdot Cs2}{W1} \right]^2. \quad (3.29)$$

Коефіцієнт викривлення лопатки робочого колеса визначається як

$$\lambda = \frac{1}{(1 - B2)}. \quad (3.30)$$

Коефіцієнт витрати від зазору лопатки

Коефіцієнт витрати від зазору лопатки можна моделювати (тільки для ротора) як

$$\text{om_cl} = \frac{2 \cdot G_{CL} \cdot \Delta p_{CL}}{(G_{in} \cdot Ro1 \cdot W1^2)}. \quad (3.31)$$

Швидкість витоку зазору

$$G_{CL} = Ro2 \cdot z \cdot drr \cdot L \cdot U_{CL}, \quad (3.32)$$

U_{CL} - тангенціальна швидкість витоку:

$$U_{CL} = 0.816 \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta p_{CL}}{Ro2}}. \quad (3.33)$$

Різниця тиску в зазорі

$$\Delta p_{CL} = \frac{G_{in} \cdot (r_2 \cdot C_{u2} - r_1 \cdot C_{u1})}{z \cdot r' \cdot l_c' \cdot L}. \quad (3.34)$$

Коефіцієнт витрат від втулки до периферії

Витрати навантаження від втулки до периферії враховують градієнт тиску в напрямку від втулки до периферії. Витрати навантаження від втулки до периферії можна розрахувати (тільки для ротора) як

$$om_{hs} = \frac{\left(\frac{k_m' \cdot l_c' \cdot W'}{W_1} \right)^2}{6},$$

$$k_m' = \frac{(\sin(\alpha_{c2}) - \sin(\alpha_{c1}))}{L}, \quad (3.35)$$

$$l_c' = \frac{(l_{c1} + l_{c2})}{2},$$

$$W' = \frac{(W_1 + W_2)}{2}.$$

Надкритичний коефіцієнт витрат потоку

Надкритичні витрати числа Маха можна розрахувати (тільки для ротора) як

$$om_{cr} = 0.4 \cdot \left[\frac{(M_1' - M_{cr}') \cdot W_{max}}{W_1} \right]^2. \quad (3.36)$$

Критичне число Маха на вході, що відповідає появі швидкості звуку на поверхні всмоктування в середині проходу, і розраховується як

$$M_{cr}' = \frac{MW_1 \cdot W^*}{W_{max}}, \quad (3.37)$$

де W_{max} - максимальна відносна швидкість:

$$W_{\max} = \frac{(W1 + W2 + \Delta W)}{2}, \quad (3.38)$$

ΔW - середня різниця швидкостей:

$$\Delta W = \frac{2 \cdot \pi \cdot D2_i \cdot U2_i \cdot \psi_i}{(z \cdot Lb)}. \quad (3.39)$$

Коефіцієнт витрат суміші розділеного потоку

Витрати при змішуванні визначаються для змішування потоків лопатевого сліду з вільним потоком:

$$\text{om_mix} = \left[\frac{(C_{s, \text{wake}} - C_{s, \text{mix}})}{W1} \right]^2, \quad (3.40)$$

Меридіональні швидкості до і після змішування оцінюються за допомогою W_{sep} і збереження маси, припускаючи, що густина газу є приблизно постійною:

$$\begin{aligned} C_{m, \text{wake}} &= \sqrt{W_{\text{SEP}}^2 - W_u^2}, \\ C_{m, \text{mix}} &= \frac{C_{s2} \cdot A2}{(\pi \cdot D2 \cdot l_{c2})}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

де W_{SEP} - відривна швидкість:

$$\begin{aligned} W_{\text{SEP}} &= w2; \quad \text{Deqx} \leq 2, \\ W_{\text{SEP}} &= \frac{W2 \cdot \text{Deqx}}{2}; \quad \text{Deqx} > 2. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Коефіцієнт витрат від загромождження каналу

$$\begin{aligned}
om_{ch} &= \frac{(0.05X + X^7)}{2}; \quad X > 0 \\
om_{ch} &= 0; \quad X \leq 0 \\
X &= 11 - \frac{10 \cdot Cr \cdot Ath}{A^*}.
\end{aligned}
\tag{3.43}$$

Аеродинамічне блокування в горлі робочого колеса визначено за співвідношенням коефіцієнтів:

$$\begin{aligned}
Cr &= \sqrt{\frac{t \cdot \sin K1}{Ath}}. \\
Cr &\leq 1 - \left(A1 \cdot \frac{\sin K1}{Ath} - 1 \right)^2.
\end{aligned}
\tag{3.44}$$

Коефіцієнт витрат від удару звукової хвилі

Витрати при ударі можна змодельовати як

$$om_{sh_m} = \frac{\left(1 - \frac{ps_out_m}{ps_in_m} \right)}{1 - is_in_m \cdot isbm_in_m)}.
\tag{3.45}$$

$$om_{sh_t} = \frac{\left(1 - \frac{ps_out_t}{ps_in_t} \right)}{1 - is_in_t \cdot isbm_in_t)}.
\tag{3.46}$$

$$om_{sh} = om_{sh_m} + 0.3 \cdot om_{sm_t}.
\tag{3.47}$$

Коефіцієнт дифузійних витрат

Вхідні дифузійні витрати обчислюються для врахування таких випадків:

$$om_{dif} = \text{equation from AxS} \cdot \text{Depends from } D_{eq}.
\tag{3.48}$$

Блокування

$$B2 = om_sf \cdot \frac{P_{v1}}{P_{v2}} \cdot \sqrt{\frac{W_1 \cdot d_H}{W_2 \cdot lc_2}} + \left[0.3 + \frac{lc_2^2}{L_B^2} \right] \cdot \frac{A_R^2 \cdot Ro_2 \cdot lc_2}{Ro_1 \cdot L_B} + \frac{d_{rr}}{2 \cdot lc_2}. \quad (3.49)$$

Блокування впливає на ділянку, через яку проходить потік у каналі.

Наприклад:

Blockage=0 - повний канал;

Blockage=0.2 - означає, що робоче тіло проходить тільки в 80% каналу.

У результаті моделювання одновимірного потоку у 1D AxSTREAM® була розрахована характеристика компресора в координатах ptr-Gin (ступінь підвищення тиску до масових витрат) з нанесеною на нею точкою, отриманою в результаті експерименту (рис. 3.10). Експериментальна характеристика взята зі звіту [7].

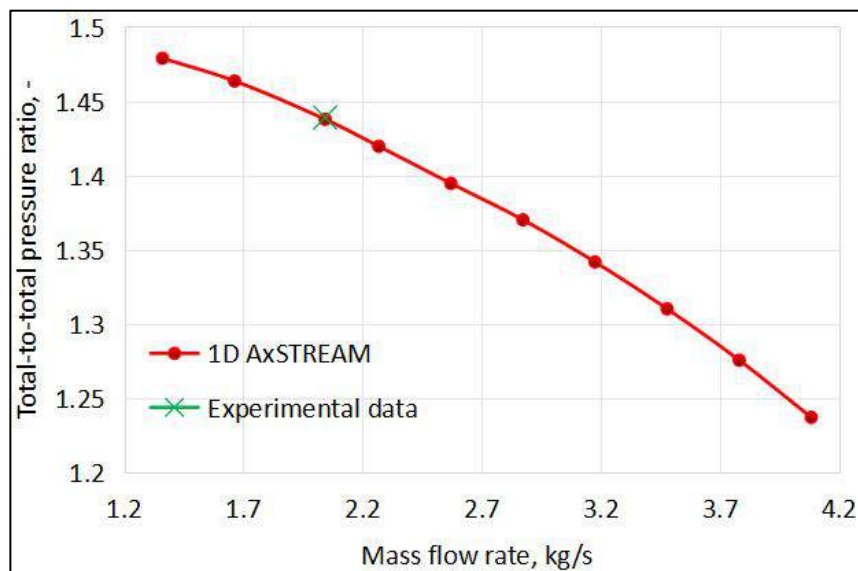


Рис. 3.10 Ступінь підвищення тиску відносно до масових витрат на вході

Також порівнювалися результати експериментальної та розрахованої у AxSTREAM® характеристики компресора в координатах (eff_ts – MFR) коефіцієнт корисної дії повно-статичний до масових витрат (рис. 3.11). Експериментальна характеристика взята зі звіту [7].

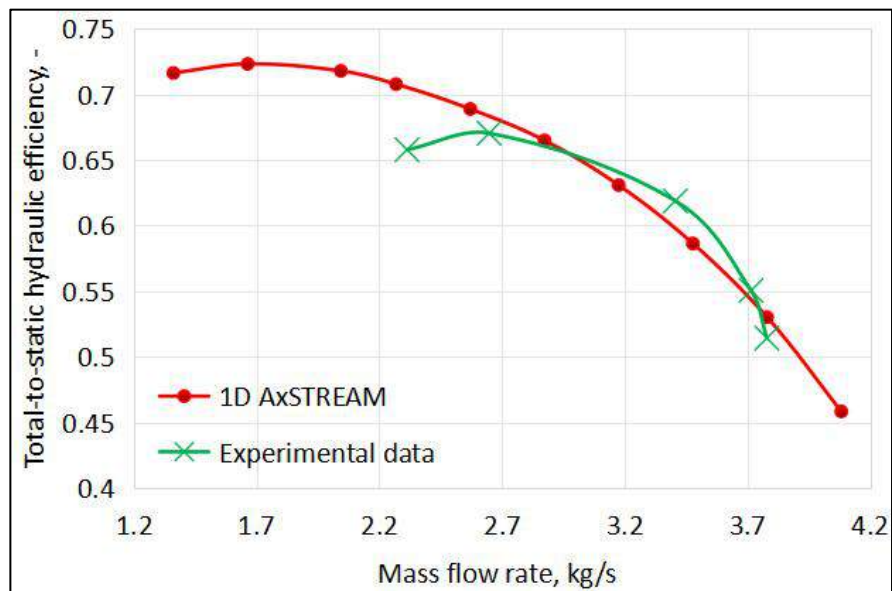


Рис. 3.11. Залежність перепаду тиску від масової витрати

Як видно з рис. 3.10, 3.11, розрахункові та експериментальні характеристики мають у межах заданого збіг для діапазону витрат (2,2 - 3,85 кг/с) для коефіцієнта корисної дії та у межах заданого збіг у проектній точці для ступеня підвищення тиску (2,043 кг/с). Деяка розбіжність у порівняльних результатах характеристик може бути пояснена тим, що в звітах з описом експерименту не було визначено розташування вимірювальних приладів.

3.2 3D математичне моделювання процесів у відцентровому компресорі

Ступінь компресора, отримана в 1D AxSTREAM®, була імпортована в 3D AxCFD™ [8] для подальших розрахунків.

Нині з інтенсивним розвитком комп'ютерних технологій особливе значення набуває математичне моделювання різних фізичних процесів. Багато фізичних процесів можуть бути описані рівняннями математичної фізики. Аналітичні розв'язки таких рівнянь отримати не вдається через нелінійність самих рівнянь та складної геометричної конфігурації області, для якої дані рівняння інтегруються. Чисельні методи вирішення рівнянь досить добре розвинені й на сьогоднішній день знайшли широке застосування в різних галузях науки та техніки. Чисельне моделювання є невід'ємною частиною процесу проектування турбомашин.

солвер AxCFD™ використовує метод скінченних елементів (FEM - Finite Elements Method). Область, у якій знаходяться розв'язки диференціальних рівнянь, розбивається на окремі регіони (елементи). У кожному з елементів відповідним чином вибирається вид апроксимуючої функції. Поза своїм елементом апроксимуюча функція дорівнює нулю. Значення функцій на межі елементів (у вузлах) є розв'язком задачі.

Для моделювання фазових переходів у відцентровому компресорі, AxCFD™ використовує структуровану сітку. Якщо безліч сіткових вузлів розрахункової сітки є впорядкованою, то така сітка називається регулярною або структурованою.

Завдання побудови розрахункової сітки полягає у знаходженні відображення, яке переводить вузли сітки з фізичної області в обчислювальну область. Дане відображення має відповідати таким вимогам: відображення має бути взаємно однозначним; сітка повинна мати згущення в областях, де можлива поява великих градієнтів розрахункових параметрів; сіткові лінії повинні бути гладкими для забезпечення безперервності похідних та максимально близькі до ортогональних; відношення сторін елемента сітки не повинно бути занадто великим.

Використання структурованих сіток (порівняно з неструктурованими сітками) дозволяє зменшити тривалість розрахунку та необхідний обсяг оперативної пам'яті комп'ютера.

При виборі способу побудови структурованих сіток необхідно враховувати такі фактори:

1. Гексагональні сітки при однакових ресурсах допускають більш високий порядок апроксимації, ніж тетраедральні сітки. Тому течії з ударними хвилями краще моделюються на гексагональних сітках, ніж на тетраедральних сітках.

2. Програми, що використовують структуровані сітки, організовані простіше, так як не вимагають зберігання та обробки інформації про сусідні вузли, ребра, грані, необхідні для розрахунку на неструктурованих сітках.

солвер AxCFD™ використовує для побудови структурованої сітки гексаедри в основному регіоні розрахункового домену та призми для побудови пограничного шару біля стінок домену (рис. 3.12).



Рис. 3.12. Елементи сітки, які використовувалися у розрахунках:

а - гексаедри, б - призми.

Для оцінки структурованої сітки можна ввести таку систему координат, в якій ця область сітки перетворюється на одиничний квадрат. У ході вирішення завдань за допомогою методів, які використовують неструктуровані сітки, вводиться локальна система координат для кожного окремого елемента сітки. На рис. 3.13, 3.14 демонструється перехід до локальної одиничної системи координат для чотирикутного елемента [9].

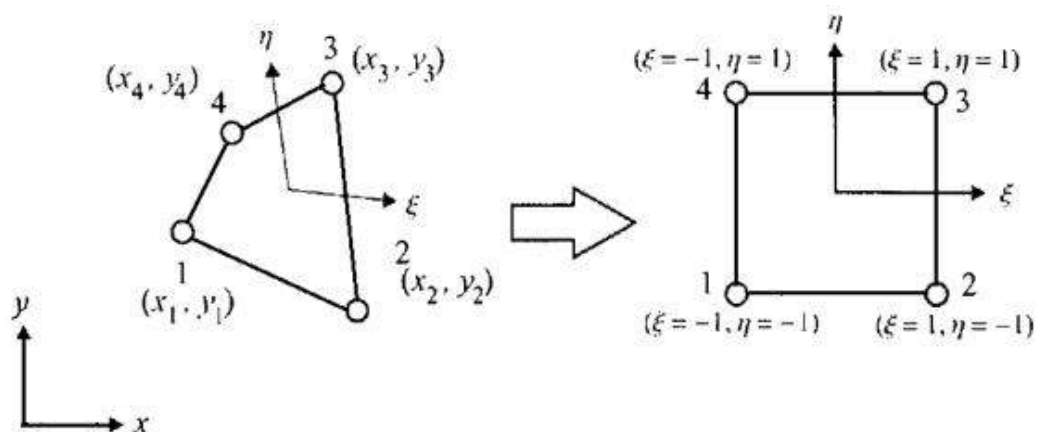


Рис. 3.13. Локальні координати для чотирикутного елемента

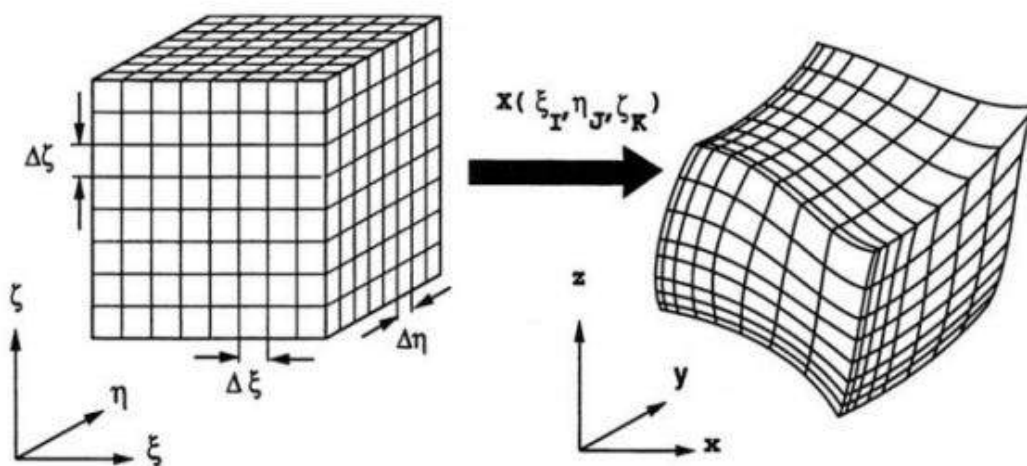


Рис. 3.14. Локальні координати для гексаедра

Координати ξ та η можна виразити через координати x та y і навпаки. Можна також обчислити похідні типу.

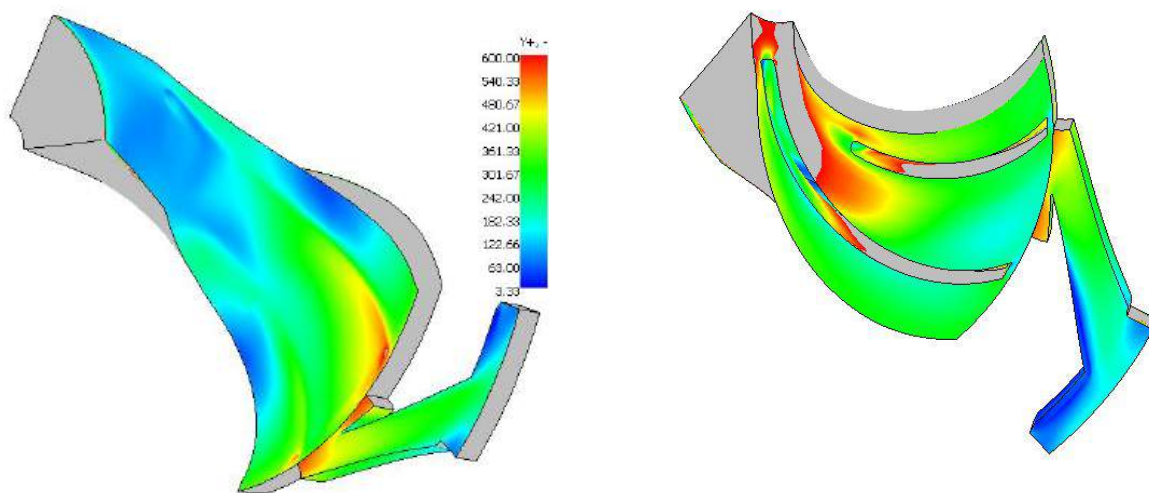
Матриця, складена з цих похідних, називається матрицею Якобі або якобіаном:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Детермінант цієї матриці характеризує площу елемента S :

$$S = \int_S dS = \int_S dx \cdot dy = \int_S |J| d\xi \cdot d\eta. \quad (3.51)$$

Детермінант матриці Якобі використовується для визначення якості елементів сітки. Саме для визначення якості елемента, показаного на рис. 3.14, необхідно обчислити визначник якобіана у вузлах 1,2,3,4, вибрати з отриманих значень мінімальний і максимальний і співвіднести їх. Аналогічним чином визначається якість тривимірних елементів (рис. 3.15).



Name	Description	Value
QualityType	Quality type	By Jacobian
Total count mesh element	Quality of mesh	180046
count with determinant <= 0	count with determinant <= 0	0
count with determinant <= 0.1	count with determinant <= 0.1	11
count with determinant <= 0.35	count with determinant <= 0.35	581
count with determinant <= 0.4	count with determinant <= 0.4	1335
count with determinant <= 0.5	count with determinant <= 0.5	5907
count with determinant <= 0.6	count with determinant <= 0.6	9040
count with determinant <= 0.7	count with determinant <= 0.7	10625
count with determinant <= 0.8	count with determinant <= 0.8	15996
count with determinant <= 0.9	count with determinant <= 0.9	25327
count with determinant <= 1	count with determinant <= 1	180046

Рис. 3.15. Y^+ розподіл та пограничний шар у доменах ротора та статора

AxCFD™ використовує спосіб побудови витягнутих сіток (SweptMesh). Будується сітка на поверхні джерела, після чого ця сітка витягується вздовж меж тіла до поверхні-мети (рис. 3.16).

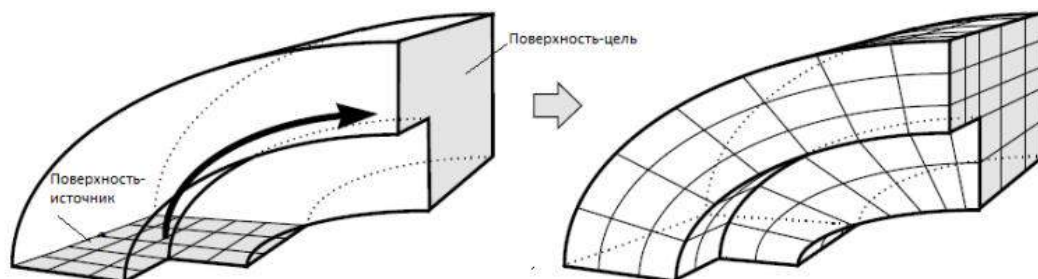


Рис. 3.16. SweptMesh сітка

При розв'язанні завдань гідрогазодинаміки та теплообміну виникає необхідність побудови сітки в області прикордонного шару. Вимога до такої сітки полягає в тому, що її комірки повинні згущуватися до стінки шарами, ортогональними до границі (рис. 3.17). У тривимірному випадку елементами сітки прикордонного шару є шестигранники та призми (залежно від виду сітки в ядрі потоку).

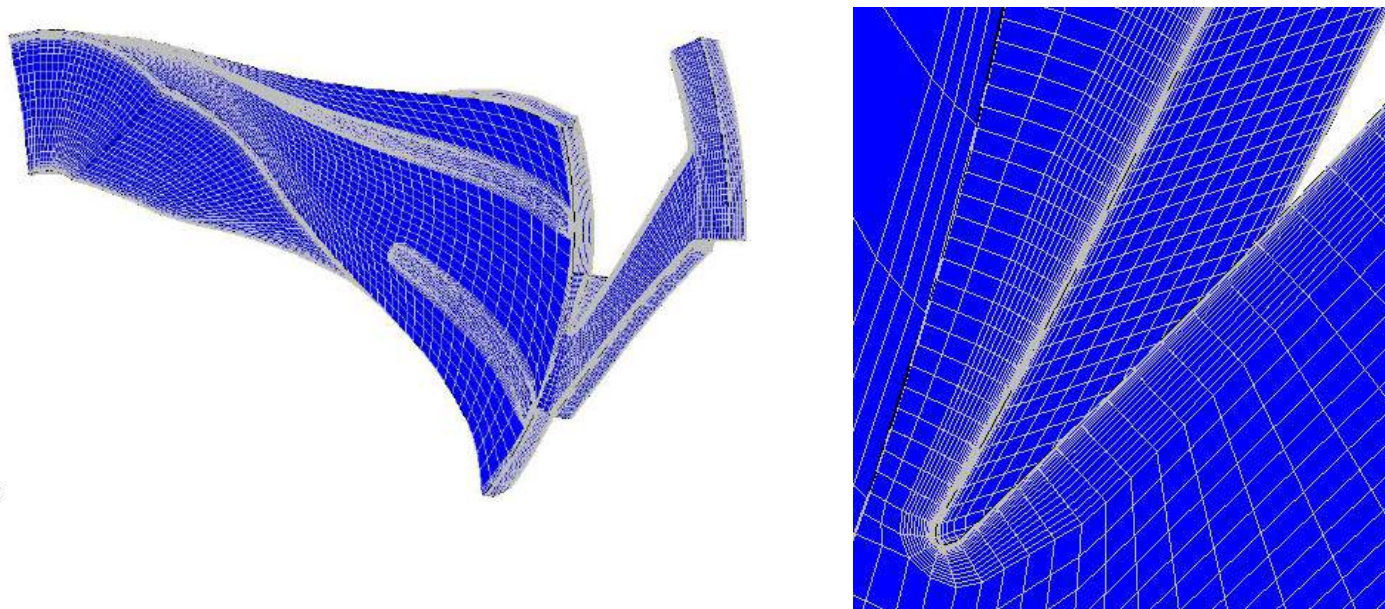


Рис. 3.17. Пограничний шар у доменах ротора та статора

Метод побудови сітки для прикордонного шару полягає в побудові набору кривих (поверхонь), еквідистантних до кривої (поверхні) стінки.

Основою розрахункової технології AxCFD™ є солвер Algebraic Coupled Multigrid. Використовуючи явну пов'язану схему інтегрування лінеаризованої системи рівнянь Нав'є-Стокса, даний солвер забезпечує досить швидку та стійку збіжність усіх типів завдань. При цьому час розв'язання задачі знаходиться приблизно в лінійній залежності від потужності розрахункової сітки.

солвер AxCFD™ досить чутливий до розмірів елементів сітки та до довжини ітераційних кроків. Точність рішення досягається як за рахунок високої точності в перерахунку на вузол, так і схемою дискретизації другого порядку. Ці властивості зберігаються при паралельному розрахунку.

Точність моделювання спирається на фізичні моделі, що використовуються в розрахунку. AxCFD™ містить значну кількість фізичних моделей для забезпечення прийнятних результатів широкого спектру завдань для лопатевих машин. Усі фізичні моделі можуть взаємодіяти одна з одною на будь-якій топології сітки, із застосуванням інтерфейсів між розрахунковими доменами.

AxCFD™ забезпечує CFD-технології моделювання для потоків, що обертаються. Інтерфейс “Mixed surface” між розрахунковими областями полегшує моделювання «статор-ротор» взаємодії. Пре- та постпроцесор містять спеціальний режим опису для аналізу гідродинаміки у турбомашинах.

Більшість течій є турбулентними, і AxCFD™ містить 5 моделей турбулентності, що дозволяють врахувати деталізацію течії. Найбільш часто використовують k-E та SST моделі з автоматичними пристінними функціями.

У AxCFD™ в інтуїтивно зрозумілому інтерфейсі містяться ефективні засоби постпроцесингу, в тому числі якісний та кількісний аналіз результатів. Засоби відображення графічної інформації дають можливість проаналізувати структуру потоку за допомогою поверхонь, перерізів та векторів. Аналіз кількісних результатів за допомогою вбудованих функцій дозволяє отримати більш точне уявлення про характеристики моделі.

Використовуючи будь-яку комбінацію наявних обчислювальних ресурсів, AxCFD™ дозволяє зменшити час розрахунку та виконати великі за обсягом

завдання. При цьому досягається така сама збіжність і точність, як і для звичайного розрахунку.

солвер AxCFD™ містить рівняння Нав'є-Стокса та рівняння енергії.

Система рівнянь Нав'є-Стокса [10]:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\zeta \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \right) \right), \quad (3.52)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} + \zeta \nabla (\nabla \cdot \vec{v}).$$

Користувач може вибрати методи дискретизації в налаштуваннях AxCFD™ Solver (рис. 3.18).

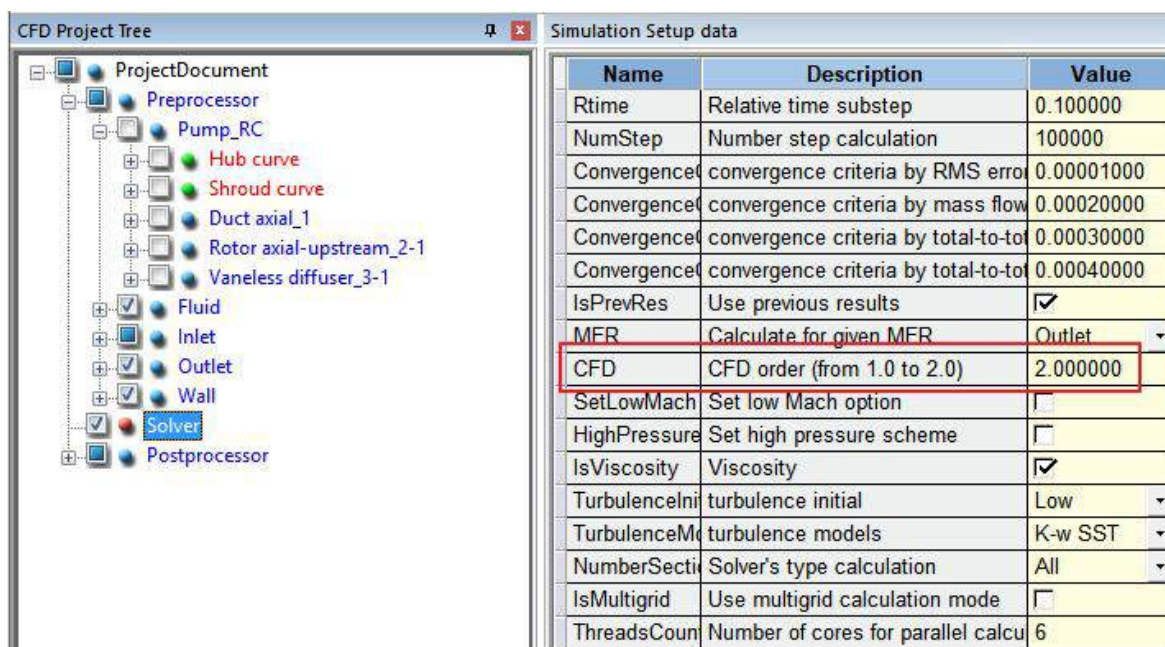


Рис. 3.18. Налаштування AxCFD™ Solver

CFD order 1 використовує метод дискретизації Годунова 1-го порядку. CFD order 2 вирішує змішану схему Годунова та схеми високого дискретизованого порядку (схеми Римана). Для початкових симуляцій з грубою сіткою рекомендовано використовувати схему Годунова 1-го порядку, але для остаточного моделювання з високоякісною сіткою користувач повинен використовувати лише схему CFD порядку 2. Якщо користувач встановлює порядок CFD=1.95, це означає, що схема

дискретизації від першого до другого порядку використовує 5% схеми Годунова першого порядку та 95% схеми Римана високої дискретизованого порядку.

Рівняння збереження імпульсу записується так:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \text{grad}(\rho v) = -\text{grad}_p + \text{grad}(\bar{\tau}) + \rho g + F. \quad (3.53)$$

В інтегральному вигляді:

$$\frac{dm}{dt} + \int_{\sigma} (r - \rho v) v_n d\sigma = - \int_{\sigma} (r - p n) d\sigma + \int_{t_0}^t F dt$$

$$m = \int_V (r - \rho v) dV$$
(3.54)

AxCFD™ використовує енергетичне рівняння для моделювання ентальпії і температури.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \text{grad}(v(\rho E + p)) = \text{grad} - k_{eff} \text{grad} T - \sum_j h_j J_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot v), \quad (3.55)$$

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}, \quad (3.56)$$

де h - ентальпія. Для ідеальних газів

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p_j} dT. \quad (3.57)$$

Для рідини

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p_j} dT + \frac{dP}{\rho}. \quad (3.58)$$

Для реального газу метод визначення ентальпії залежить від рівняння стану.

Рівняння енергії в інтегральній формі:

$$\frac{dE}{dt} + \int_{\sigma} \rho \frac{v^2}{2} + e v_n d\sigma = - \int_{\sigma} p v_n d\sigma. \quad (3.59)$$

Рівняння (3.59) для солвера AxCFD™ на основі густини включає роботу тиску та умови кінетичної енергії, які є дуже незначними для потоку нестисливої речовини. Крім того, рівняння (3.59) включає члени в'язкої дисипації, які описують

теплову енергію, створювану в'язким зсувом у потоці. Для випадків, коли в'язкість не враховується, солвер AxCFD™ моделює нев'язкий потік. Потоки з нехтуванням ефектом в'язкості підходять для випадків з високим числом Рейнольдса, де інерційні сили є досить високими, ніж сили в'язкості.

Загальні закони збереження, які були описані раніше, повинні бути доповнені рівняннями стану (EoS) - солвер AxCFD™ обчислює тиск, ентропію та внутрішню енергію за допомогою цих рівнянь.

Проблема розрахунку області критичної точки є очевидною для 3D-розрахунку. Рівняння стану Анг'є-Редліха-Квонга було обрано як модель, що описує реальний газ. Як відомо, подібні рівняння дають задовільний збіг з експериментальними значеннями в надкритичній та газовій, проте з великою похибкою описують області двофазного та рідкого станів. В області критичної точки спостерігаються значні флуктуації густини, які, у свою чергу, призводять до різких змін термодинамічних та калоричних показників.

Оскільки граничні умови (ГУ) на вході знаходяться поблизу критичної точки, був прийнятий наступний алгоритм досягнення збіжності розрахунку:

Розрахунок з ГУ, віддаленими на 15% від дійсних ГУ (9,07 МПа, 352,4 К);

Після досягнення хорошої збіжності перехід на ГУ віддалений на 10% (8,68 МПа, 337К). При цьому результат попереднього розрахунку є початковим наближенням для нового розрахунку;

Розрахунок з ГУ, віддаленими на 5% від дійсних граничних умов (8.28 МПа, 321.7 К);

Розрахунок з ГУ, віддаленими на 3% від дійсних граничних умов (8.13 МПа, 315.6 К);

Розрахунок з дійсними ГУ (7.89 МПа, 306.4К).

Робоче тіло CO₂ описується властивостями, необхідними для обраного рівняння стану і включає:

- параметри в критичній точці: тиск, температура та густина (7.377МПа; 304.13К; 467.6кг/м3);

- коефіцієнт ацентричності (0.224);

- молярну масу (44.01 кг/кмоль);
- поліноміальні коефіцієнти A1-A5 (які є функцією $C_p0(T)$);
- референсну точку: тиск, температуру, внутрішню енергію та ентропію (параметри взяті для 500K та 1 МПа з NIST RefPROP)

Як модель турбулентності була обрана k-Epsilon та інтенсивність турбулентності - 1%. Модель турбулентності k-Epsilon використовує поняття кінетичної енергії турбулентних пульсацій і швидкості дисипації енергії турбулентних пульсацій. Для попередніх розрахунків така модель турбулентності достатня, так як для неї не потрібен дуже точний опис прикордонного шару, що замінюється алгебраїчними залежностями. Y^+ для такої моделі не повинен бути нижчим за 120 на стінках.

k-Epsilon модель є однією з найбільш використовуваних моделей турбулентності. До неї входять два додаткові транспортні рівняння та дві залежні змінні: турбулентна кінетична енергія, k , і швидкість турбулентної дисипації, ε . Турбулентна в'язкість моделюється як

$$\mu_T = \rho \cdot C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (3.60)$$

де C_μ - константа моделі.

Еквівалент для k :

$$\rho \frac{dk}{dt} + \rho U \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \varepsilon. \quad (3.61)$$

Еквівалент для ε :

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \rho U \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \rho. \quad (3.62)$$

Константи моделі у рівняннях (3.60) – (3.62) зведено в табл. 3.4.

Таблиця 3.4. Константи моделі k-Epsilon

C_μ	0.09
$C_{\varepsilon 1}$	1.44
$C_{\varepsilon 2}$	1.92
σ_k	1.0
σ_ε	1.3

Потік поблизу стінки сильно відрізняється від вільного потоку посеред каналу. Для моделювання потоку поблизу стінок використовуються пристінкові функції. Виражене в одиницях в'язкості, відрив потоку від стінки визначається формулою

$$\delta_w^+ = \max\left(\frac{h}{2} \cdot \frac{\rho C_\mu^{1/4} \sqrt{k}}{\mu}, 11.06\right). \quad (3.63)$$

Перший аргумент - відстань від стінки. Другим аргументом є в'язкість, де логарифмічний шар зустрічається з в'язким підшаром.

На рис. 3.19 показана історія збіжності рішення у AxCFD™, де сині лінії - масові витрати, зелена - гідравлічний коефіцієнт корисної дії, фіолетова - ступінь підвищення тиску, червоні лінії - нев'язки для рівняння енергії та моделі турбулентності.

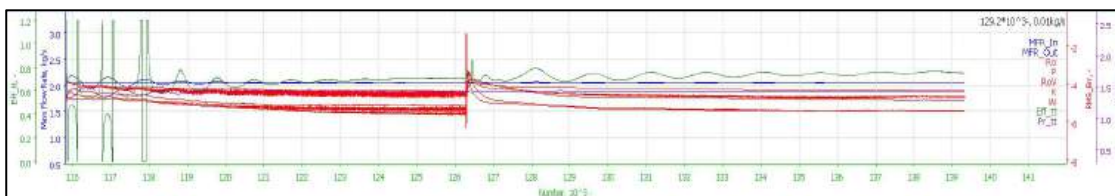


Рис. 3.19 Збіжність рішення в AxCFD™

Результати, отримані під час рішення, занесено до табл. 3.5. Картина течії у відцентровому компресорі показана на рис. 3.20 - 3.25.

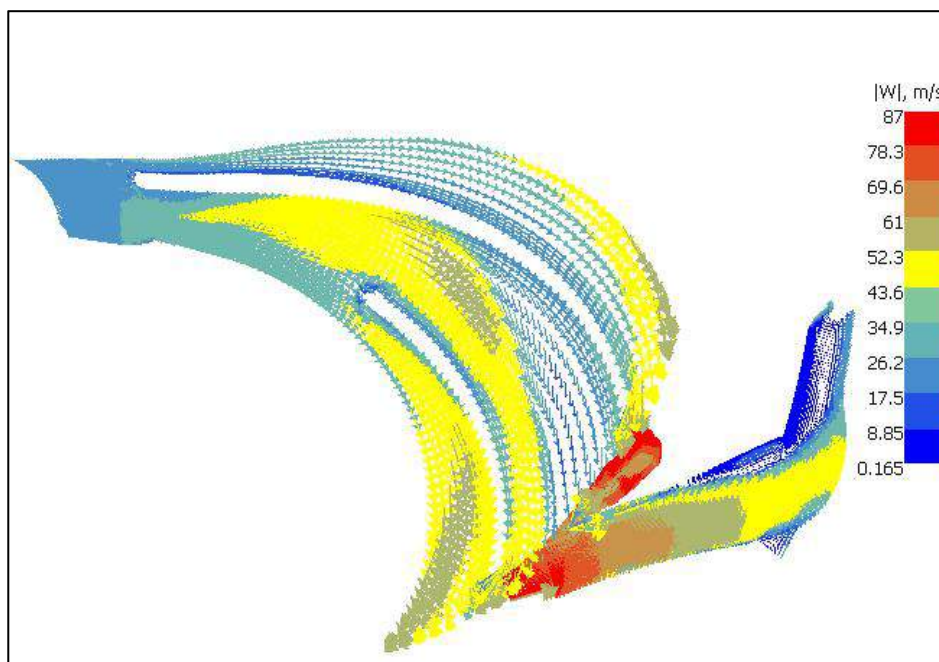


Рис. 3.20. Вектори швидкості в перерізі 10% від кореневого перерізу

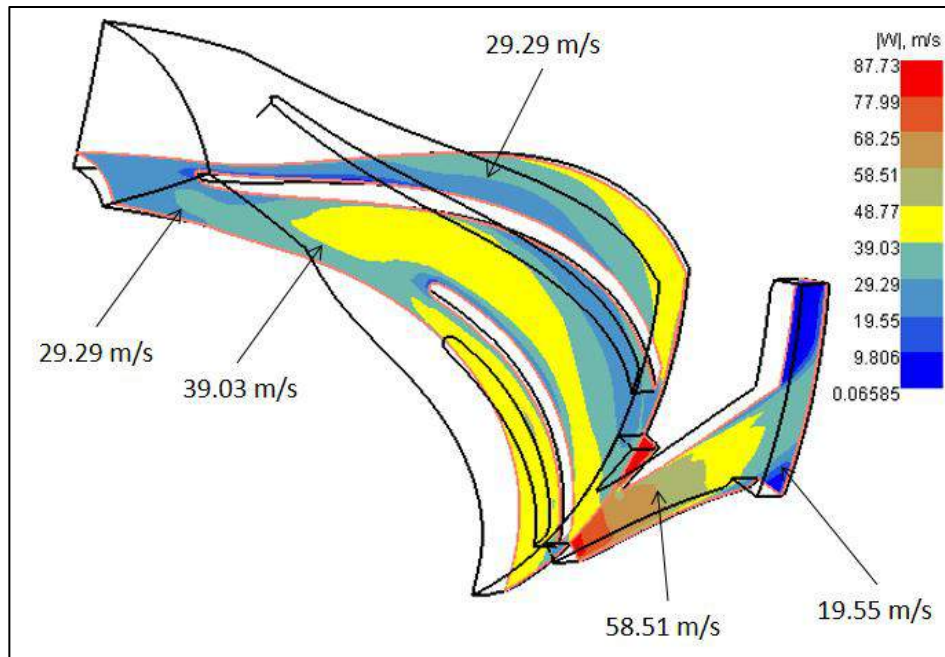


Рис. 3.21. Поле розподілу відносної швидкості у перерізі 10% від кореневого перерізу

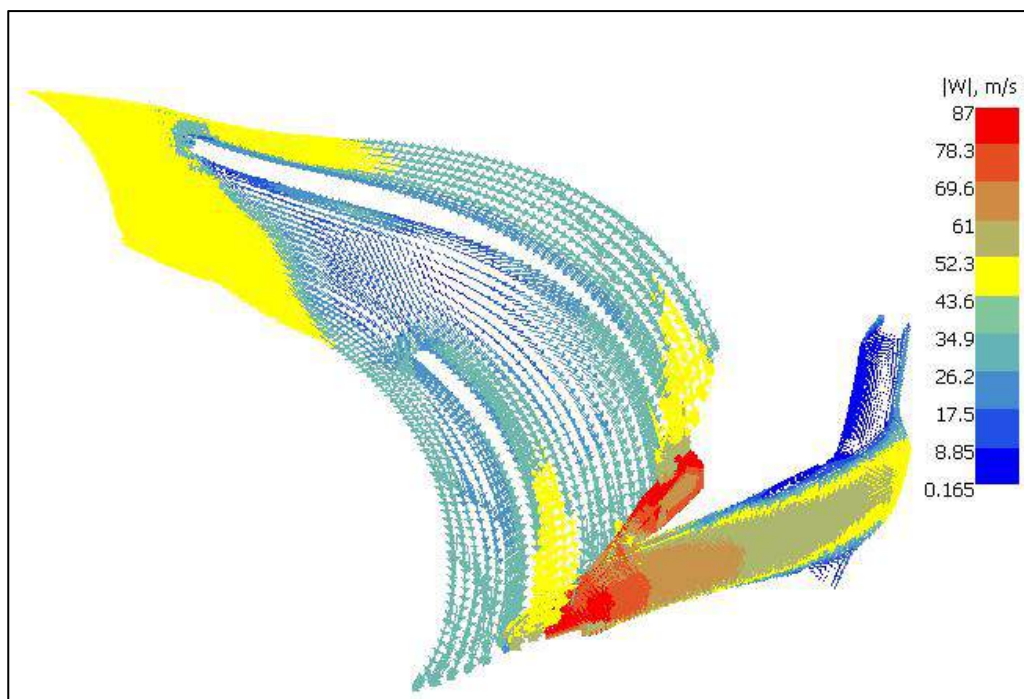


Рис. 3.22. Вектори швидкості у перерізі 50% від кореневого перерізу

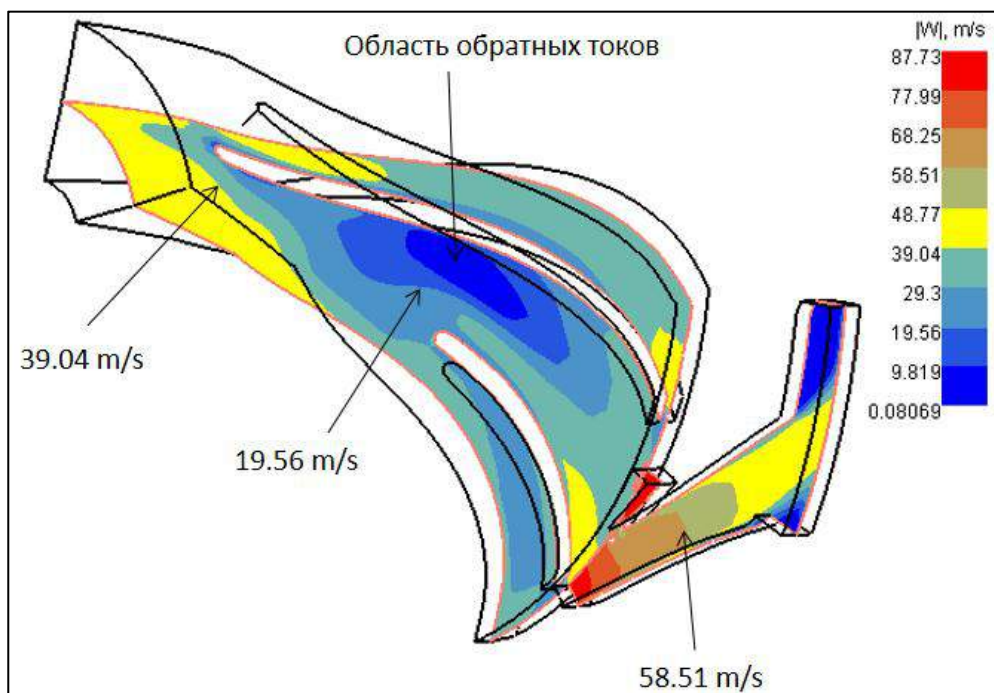


Рис. 3.23. Поле розподілу відносної швидкості на перерізі 50% від кореневого перерізу

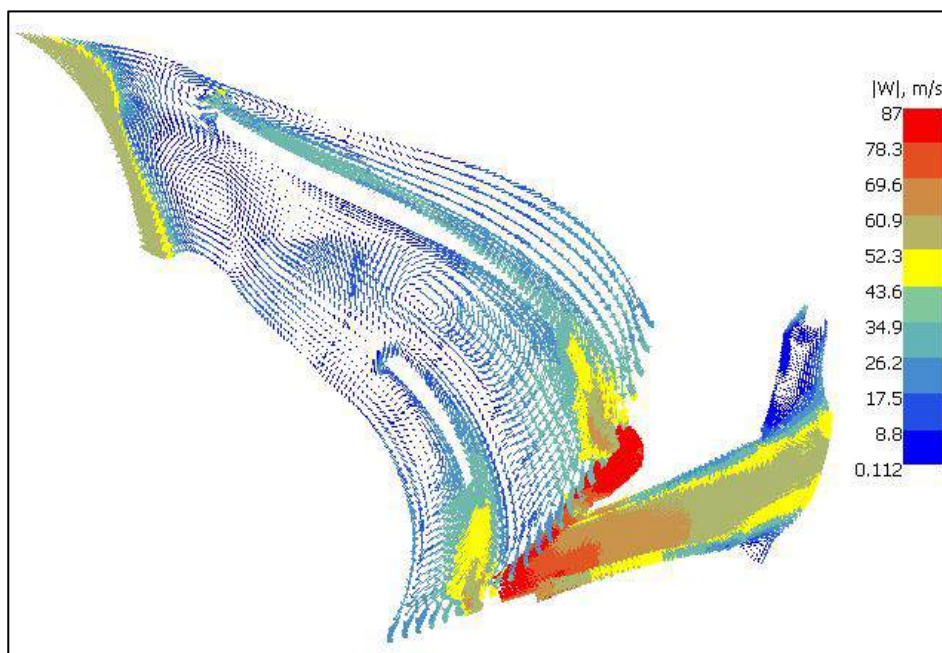


Рис. 3.24. Вектори швидкості у перерізі 90% від кореневого перерізу

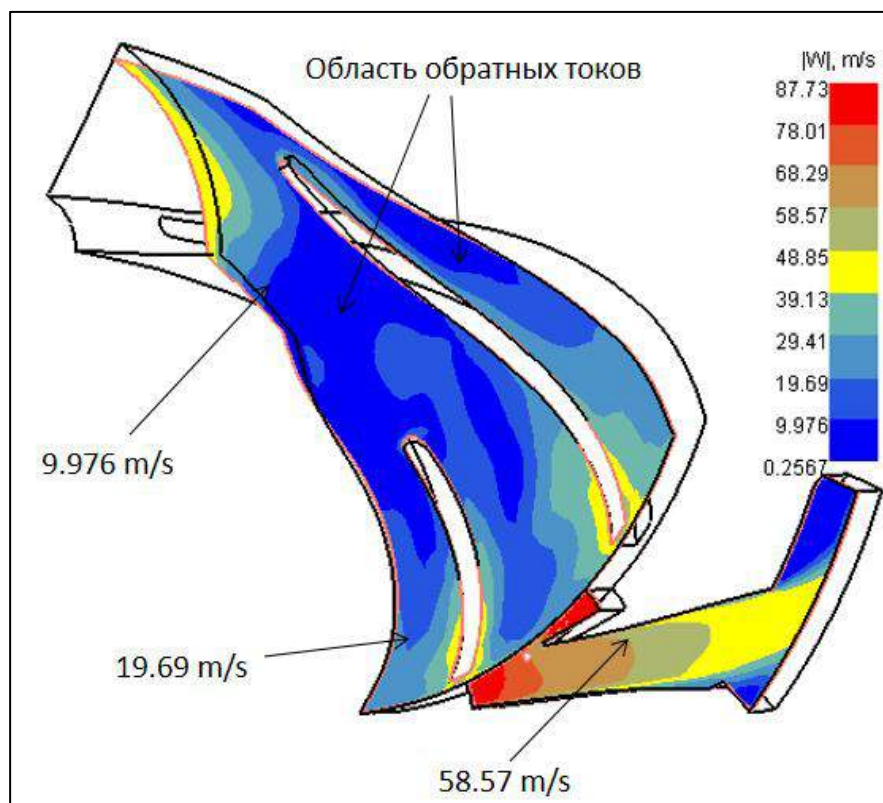


Рис. 3.25. Поле розподілу відносної швидкості на перерізі 90% від кореневого перерізу

Таблиця 3.5. Порівняльний аналіз 1D AxSTREAM[®] та 3D AxCFD[™] результатів з експериментальними даними у проектній точці

Параметри	Одиниці вимірювання	1D AxSTREAM	3D AxCFD	Результати експерименту
вхід				
Pt	Па	7890000	7894500	7890000
Tt	К	306,40	306,42	306,40
Rho	кг/м ³	567,04	476,14	-
вихід				
Pt	Па	11365008	11254000	11353000
Tt	К	318,48	319,39	-
Rho	кг/м ³	619,82	511,64	-
Параметри компресора				
Масові витрати на вході	кг/с	4,50	4,51	4,50

Масові витрати на виході	кг/с	4,50	4,50	4,50
Ступінь стиснення тиску	-	1,44	1,43	1,439
ККД	-	0,72	0,73	0,628

Характеристика компресора в координатах ступінь підвищення тиску до масових витрат (p_{tr} -Gin), яка розрахована у AxCFD™ була порівняна з результатами експерименту та характеристикою, отриманою в 1D AxSTREAM® (рис. 3.26):

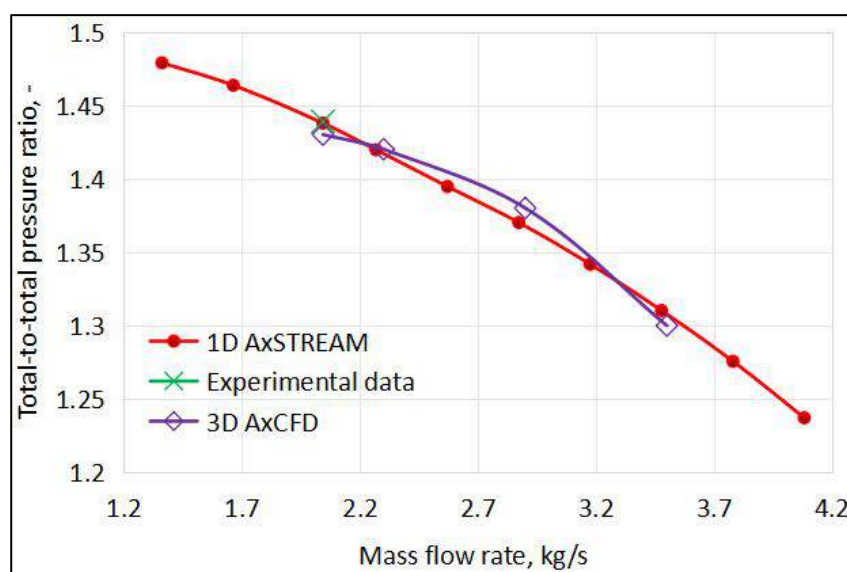


Рис. 3.26 Ступінь підвищення тиску відносно до масових витрат на вході

Також характеристика компресора в координатах eff_{ts} -Gin, яка розрахована у AxCFD™ була порівняна з результатами експерименту та характеристикою, отриманою за допомогою 1D AxSTREAM (рис. 3.27). Експериментальна характеристика взята зі звіту [1]

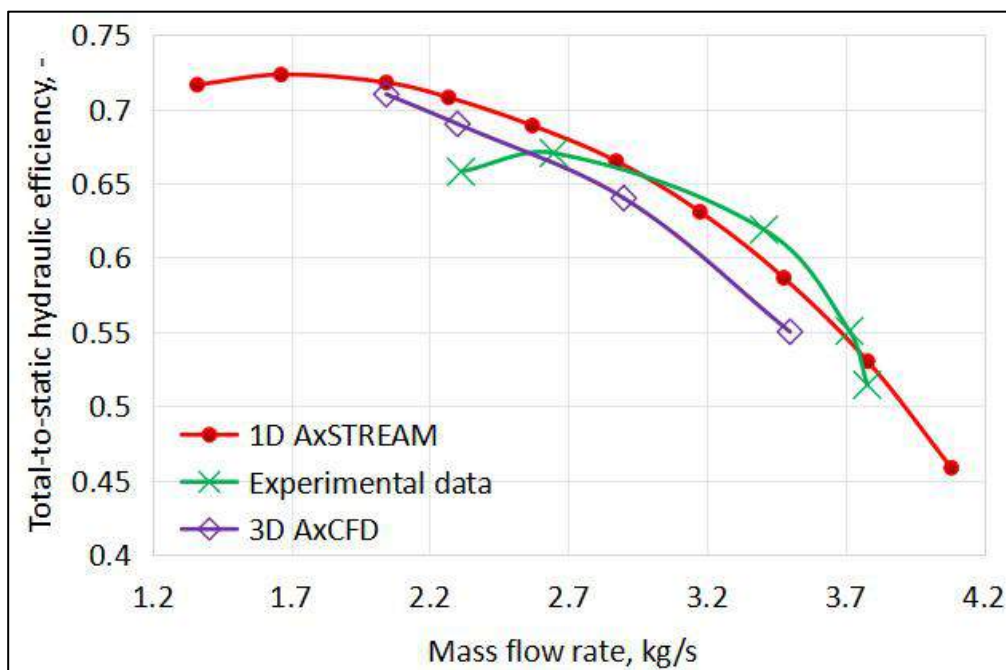


Рис. 3.27. Гідравлічний коефіцієнт корисної дії відносно до масових витрат

Розрахункові та експериментальні характеристики мають у межах заданого збіг для діапазону витрат (2.2 кг/с - 3.85 кг/с) для коефіцієнта корисної дії, а також у межах заданого збіг для ступінь підвищення тиску в проектній точці.

Характеристика у програмному пакеті AxCFD™ розраховується за методом псевдорівноважного стану. Важливим аспектом методу, обговорюваного в роботі [12], є те, що моделювання CFD має виконуватися в псевдорівноважному стані. Для цього потрібно отримати рішення з гарною збіжністю. Це практично забезпечується шляхом виконання типового моделювання з фіксованими граничними умовами та використанням результатів у якості початкової умови, а також включення початкового періоду без кроку по часу для кількох сотень ітерацій у функціях для масових витрат та перепаду тиску. Спосіб досягнення цього полягає в тому, щоб зробити корекцію на кожній достатньо малій ітерації. Для моделювання відцентрового компресора масові витрати на виході змінюються шляхом зменшення їх від проектних умов доки стійкість моделювання не стане незначною. Наступні умови та рівняння описують метод зміни граничних умов.

$$MFR_{boundary} = MFR_{base} \cdot R_n. \quad (3.64)$$

$$R_n = 1 - n_c \cdot r_n, \quad (3.65)$$

де R_n - відносний ітераційний крок;

n_c - номер ітерації

MFR_{base} - базове значення масових витрат.

Значний вплив на картину течії на відносній висоті 50-90% має зазор - його величина 0,254 мм при загальній висоті лопатки на вході 6,83 мм і на виході 1,7 мм. Потік, що перетікає через проміжок, формує вихор, що затихає лише на 50% відносної висоти лопатки (рис. 3.20 – 3.25). При цьому варто відзначити, що відривів потоку від лопаток ротора та статора не формується. В табл. 3.5 подано результати 3D розрахунку. Коефіцієнт корисної дії в AxCFD™ є гідравлічний, який не враховує дискове тертя. Таким чином, цей параметр виходить на 1-2% вище за реальний коефіцієнт корисної дії, який наведено в експериментальних даних. Варто звернути увагу на значну розбіжність у значеннях густини між 1D та 3D розрахунками. Порівняно результати густини між 3D AxCFD™ та NIST RefPROP у табл. 3.6.

За результатами, наведеними в табл. 3.6, видно, що в області критичної точки густина має значну відмінність від експериментальних даних, але з віддаленням від критичної точки різниця в результатах зменшується.

Таблиця 3.6. Порівняння результатів густини 3D AxCFD™ та NIST RefPROP для проектної точки

Параметри	Одиниці вимірюван ня	3D AxCFD	NIST RefPROP
		вхід	
Pt	Па	7894500	7894500
Tt	К	306.42	306.42
Rho	кг/м ³	476.14	568.65
		вихід	

Pt	Па	11254000	11254000
Tt	К	319.39	319.39
Rho	кг/м ³	511.64	598.41

3.3 Висновки до третього розділу

1. Відтворено у 1D AxSTREAM[®] відцентровий компресор, дані про який отримано зі звіту Sandia National Laboratories. За робоче тіло обрано табличний флюїд CO₂, властивості якого взято з NIST RefPROP. Порівняльний аналіз експериментальних даних із характеристиками, розрахованими у 1D AxSTREAM[®], показав у межах заданого збіг (менше 5%) для ступеня підвищення тиску та для коефіцієнту корисної дії.

2. Сформовано опис властивостей робочого тіла для подальшого розрахунку 3D AxCFD[™], який використовує як основу рівняння стану Анг'є-Редліха-Квонга. Модель добре описує властивості робочого тіла в надкритичній та газовій областях (похибка менше 1%), але недостатньо точна для рідкої (більше 30%), двофазної (більше 15%) та навколокритичної (більше 20%) областей.

3. Оригінальне рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є можна використовувати для моделювання потоку у відцентровому компресорі з граничними умовами для проектної точки, в якій робоче тіло знаходиться в надкритичному стані та не має фазового переходу.

4. Розроблено псевдорівноважний метод розрахунку характеристики компресора у 3D AxCFD[™].

5. Порівняльний аналіз характеристик, отриманих із розрахунків у 3D AxCFD[™], з експериментальними даними та з характеристиками, розрахованими у 1D AxSTREAM[®], показав у межах заданого збіг (менше 5%) для ступеня підвищення тиску та для коефіцієнту корисної дії.

6. Математична модель рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є неспроможна моделювати фазовий перехід від рідкого стану до надкритичного або від двофазного

стану до надкритичного в регіоні, дотичному до критичної точки, з помірною похибкою (не більше 5%) при розрахунках параметрів потоку компресора.

Результати, отримані у третьому розділі, опубліковано в роботах [9], [10].

3.4. Література до третього розділу

- [1] Wright, S. A., Pickard, P. S., Fuller, R., Radel, R. F., & Vernon, M. E. (2009). Supercritical CO₂ Brayton Cycle Power Generation Development Program And Initial Test Results. *ASME 2009 Power Conference*. <https://doi.org/10.1115/power2009-81081>
- [2] Wright, S. A., Conboy, T. M., Radel, R. F., & Rochau, G. E. (2011). Modeling And Experimental Results For Condensing Supercritical CO₂ Power Cycles (No. SAND2010-8840). Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States). <https://doi.org/10.2172/1030354>
- [3] Rapp, L. (2022a). Sandia National Laboratories: From Laboratory To Large-Scale SCO₂ Brayton Cycle Development. *Proposed for Presentation at the 7th International sCO₂ Power Cycles Symposium Held February 21-24, 2022 in San Antonio, Texas United States of America*. <https://doi.org/10.2172/2001784>
- [4] <https://wiki.softinway.com/id/13/centrifugal-compressor>.
- [5] Howard, J., Knudsen, P., & Engeda, A. (2023, June). Empirical Loss Model Optimization For The Prediction Of Centrifugal Compressor Off-Design Performance. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (Vol. 87110, p. V13DT35A015). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/GT2023-103013>
- [6] https://wiki.softinway.com/id/6706/turbopump_positive-pressure-gradient-machine
- [7] <https://wiki.softinway.com/id/3185/tutorial>
- [8] Солодов, В. Г. (2017). Применение пакета прикладных программ ANSYS для решения задач гидрогазодинамики: учебное пособие. Харьков: ХНАДУ.
- [9] Vorobiova, Hanna & Dolmatov, Dmytro & Fesenko, Kseniia & Sysoiev, Iurii & Dehtiarov, Oleh & Ivashchenko, Maryna. (2024). Effect Detection Of Using A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State On The Calculation Of Carbon Dioxide Flow In A Centrifugal Compressor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2. 54-65. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.

[10] Vlad Goldenberg, Ben Conser, Anna Vorobyova (2023). A Method Of Pseudo-Steady State CFD Calculation To Predict Turbomachine Characteristics. ASME Turbo Expo 2023 Turbomachinery Technical Conference and Exposition GT2023 June 26-30, Boston, Massachusetts <https://doi.org/10.1115/GT2023-101016>

РОЗДІЛ 4. МОДИФІКАЦІЯ РІВНЯННЯ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ДЛЯ РОБОЧОЇ ОБЛАСТІ CO₂

Для моделювання фазових переходів безпосередньо в регіоні критичної точки CO₂ описаний у третьому розділі відцентровий компресор може бути розрахований у 3D AxCFD™ з модифікованим рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є. Модифіковане рівняння стану має бути порівняно з експериментальними результатами для температурного діапазону від мінімальної температури робочого тіла до надкритичних умов роботи відцентрового компресора. У якості граничних умов прийнято умови з серії експериментів C - рідкий CO₂ на вході до компресора (296 K). Для подальшого порівняння результатів має бути розроблена програма для розрахунку тиску при заданих температурі та діапазоні для густини від мінімальної густини 10 кг/м³ до максимальної 1200 кг/м³. Результати роботи програми буде наведено в розділі 5. Завдяки умовам, які розділяють робочий діапазон CO₂, солвер буде вибирати правильні рівняння для конкретної фази робочого тіла. Рівняння, які використовувалися у програмі, наведено в цьому розділі.

При аналізі фазової рівноваги та процесів фазових переходів важливу роль відіграє «правило фази Гіббса». Воно встановлює залежність між числом фаз та числом компонентів системи. У разі використання чистої речовини система складається з N=1 компонента, який присутній у всіх m фазах. Стан термодинамічної рівноваги системи характеризується (m-1) попарними рівнями для температури, (m-1) попарними рівнями тиску в фазах, N(m-1) попарними рівнями хімічних потенціалів компонентів у фазах. Число ступенів свободи F є додатковою різницею між числом незалежних інтенсивних змінних у фазах системи m(N+1) та числом рівнів між цими змінними (m-1)(N+2). Тому

$$F = m(N + 1) - (m - 1)(N + 2) = N - m + 2. \quad (4.1)$$

Рівняння (4.1) називається "правилом фази Гіббса". Воно дає відповідь на два основних питання:

- яке максимально можливе число співвісних фаз у системі із заданим числом компонентів;

- яке число незалежних змінних необхідно задати для забезпечення однозначності інших змінних, що характеризують цю систему.

Для однокомпонентної системи $F_{\max} = 2$, і фазовий стан такої системи може бути представлений двомірною площиною P, T . Максимальна кількість фаз, які можуть співіснувати в N -компонентній речовині, дорівнює

$$m_{\max} = N + 2. \quad (4.2)$$

Наприклад, у випадку двофазної парорідкої рівноваги $m=2$ для системи з чистою речовиною. Для однокомпонентної системи $F=1$. Це означає, що існує взаємно однозначна відповідність між температурою та тиском, при якій речовина знаходиться в стані парорідкої рівноваги.

Залежність тиску насиченої пари чистої речовини від температури починається в потрійній точці та завершується в критичній точці. Точка називається потрійною, тому що вона відповідає єдиним для даної речовини значенням тиску та температури, при яких вона одночасно може перебувати в трифазному рівноважному стані пар-рідина-тверде тіло. Це впливає з правила фази Гіббса: при $N=1$ та $m=3$ число термодинамічних ступенів свободи $F=0$.

Критична точка для однокомпонентної системи має найвищі значення тиску та температури, при яких можна співвідносити пару та рідку фазу. В області, обмеженій лінією рівноваги рідина - тверде тіло (лінією плавлення), а знизу - кривою рівноваги рідина - пара (кривою насиченої пари), при будь-яких тисках речовина знаходиться в однофазному стані. Ліворуч від потрійної точки проходить лінія рівноваги газ-тверде тіло, яка називається кривою сублімації. При будь-яких тисках нижче тиску насиченої пари або сублімації та заданої температури речовина знаходиться в однофазному газовому стані. При будь-якій температурі вище критичної та будь-яких тисках речовина знаходиться в однофазному стані. Приймаючи умовно, що в усій цій області стан речовини є газовим, при будь-яких тисках вище критичної ізотерми це є умовною межею, що розділяє рідкий та газовий стани речовин. Оскільки за цих термобаричних умов немає поверхонь поділу між фазами, то перехід із рідкої фази в газ (і навпаки) відбувається при безперервних змінах властивостей речовин. Це означає, що будь-яку речовину

можна перевести з газоподібного стану в рідкий (і навпаки), минаючи двофазну ділянку (рис. 4.1).



Рис. 4.1. Фазова діаграма «Тиск-Температура» чистої речовини

З наближенням температури до критичної двофазна область звужується. При температурі, що дорівнює критичній, горизонтальна ділянка перетворюється на точку, густина парової та рідкої фази залишаються рівними, поверхня розділу між фазами зникає.

Відповідно до описаного вище, в критичній точці різниця мольних об'ємів парової та рідкої фази дорівнює нулю. У критичній точці перетворюється на нуль і теплота пароутворення. Це впливає з рівняння Клайперона-Клаузіуса у вигляді

$$r = T(V^{\text{vap}} - V^{\text{liq}}) \frac{dP}{dT}. \quad (4.3)$$

Оскільки dP/dT не може бути нескінченно великою, в критичній точці $r=0$.

У критичній точці ізотерма $T_c = \text{const}$ має горизонтальну дотичну та перегин (рис. 4.2):

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T_c, V_c} = 0, \quad (4.4)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_{T_c, V_c} = 0.$$

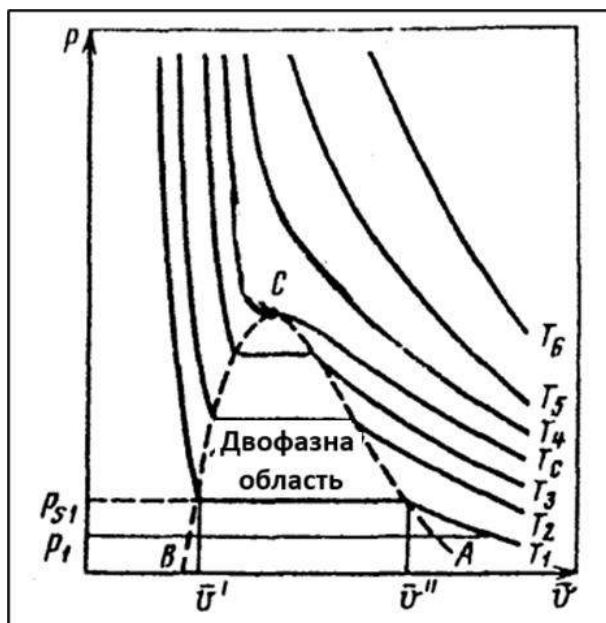


Рис. 4.2. Фазова діаграма «Тиск-Питомий об'єм» чистої речовини

Для виправлення недоліків рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є при описі PVT-властивостей вуглекислого газу в навіколокритичній області та при фазових переходах, показаних у попередньому розділі, автором дисертації поставлено завдання створення модифікованого рівняння стану.

Особливу увагу при розробці математичної моделі приділено опису навіколокритичної області та областей поблизу лінії насичення, де відбувається фазовий перехід робочого тіла з одного агрегатного стану в інший.

У цьому розділі описана математична модель та результати розв'язання викладеної вище задачі на основі модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є.

Методика дослідження складається з двох основних етапів:

- 1) Визначення значущості параметрів рівняння для робочого тіла в окремих фазах робочого тіла.
- 2) Отримання виразів для розрахунку теплофізичних властивостей робочого тіла з урахуванням прийнятої форми рівняння стану.

У параграфах 4.1 та 4.2 у методичних цілях докладно розглядаються способи розрахунку властивостей вуглекислого газу при використанні рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є.

4.1 Визначення значень параметрів модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є в окремих фазах робочого процесу

4.1.1 Математичне моделювання робочого тіла в надкритичній та газовій областях

Якщо поточна температура вище критичної, робоче тіло знаходиться в надкритичній ділянці. Якщо поточна температура нижче критичної та ступінь вологості менше 0, робоче тіло знаходиться в газовій області. Для обох областей можна використовувати рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є без будь-яких модифікацій.

Вихідні дані для газової та надкритичної областей:

- критичні властивості: тиск, температура, густина, об'єм;
- коефіцієнти ацентричності;
- молярна маса, універсальна газова стала;
- поточні значення температури та густини.

Рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є:

$$P = \frac{RT}{(V-b')} - \frac{a(T)}{V(V+b_0)}, \quad (4.5)$$

де R - газова стала;

T – поточне значення температури;

V – об'єм робочого тіла. Об'єм знаходиться як $V=1/R_0$, де R_0 - поточне значення густини:

$$a(T) = \frac{T_{cr}^n}{T} \quad (4.6)$$

$$n = 0.4986 + 1.1735\omega + 0.475\omega^2$$

$$b_0 = 0.08664 \frac{RT_{cr}}{P_{cr}}$$

$$c = \frac{RT_{cr}}{P_{cr} + \frac{a}{V_{cr} * (V_{cr} + b_0)}} + b_0 - V_{cr}$$

$$b' = b_0 - c$$

4.1.2 Математичне моделювання двофазної області робочого тіла

Якщо поточна температура нижче критичної, то робоче тіло знаходиться в двофазній області.

Вихідні дані для двофазної області:

- критичні властивості: тиск, температура, густина, об'єм;
- коефіцієнти ацентричності;
- молярна маса, універсальна газова стала;
- поточні значення температури та щільності.

Ступінь сухості є основним параметром, що характеризує робоче тіло в двофазній області та дозволяє змінити теплофізичні властивості робочого тіла. Визначення ступеня сухості в двофазній області умовно можна розділити на три етапи: визначення тиску насиченої пари, визначення обсягу недостатньої та газової фази, визначення ступеня сухості.

Термодинамічні властивості співвісної парової та рідкої фаз чистої речовини можна обчислити на основі рівняння стану та умов фазового рівняння;

$$T^{liq} = T^{vap} = T, \quad (4.7)$$

$$P^{liq} = P^{vap} = P_{vp},$$

$$\varphi(T, P)^{liq} = \varphi(T, P)^{vap}.$$

де T - температура, P - тиск, $\phi=f/P$ - коефіцієнт летючості. Верхні індекси liq, var відносяться відповідно до насичених рідких та парових фаз. З цих умов випливає залежність

$$P_{vp} = P_{vp}(T), \quad (4.8)$$

$$P^{var} = \frac{R \cdot T}{(V^{var} - b')} - \frac{a(T)}{V^{var} \cdot (V^{var} + b_0)}, \quad (4.9)$$

$$P^{liq} = \frac{R \cdot T}{(V^{liq} - b')} - \frac{a(T)}{V^{liq} \cdot (V^{liq} + b_0)},$$

$$P^{var} = P^{liq} = 0.$$

З виразів (4.8), (4.9) та рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є випливає, що рівняння тиску насичення та об'єми рідкої та парової фаз забезпечують рівність площ BDE та EFG (Рис. 4.3). Це і є класичною умовою фазової рівноваги.

З рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є та умови (4.9) випливає, що

$$P_{pv}(V^{var} - V^{liq}) - \int_{V^{var}}^{V^{liq}} \left[\frac{R \cdot T}{(V - b')} - \frac{a(T)}{V \cdot (V + b_0)} \right] dV = 0. \quad (4.10)$$

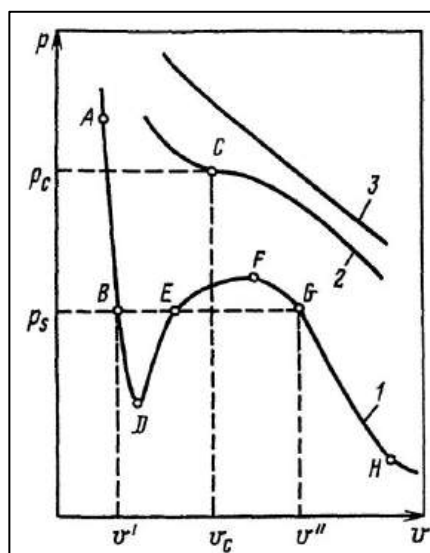


Рис. 4.3. Ізотерми кубічного рівняння при температурі нижче (крива 1), що дорівнює (крива 2) і вище (крива 3) критичної.

З умови Максвелла має слідувати рівність площ, зайнятих газовою та рідкою фазами:

$$F_{\text{ARK}} = \int_{V^{\text{vap}}}^{V^{\text{liq}}} P^{\text{vap}} dV - P_{\text{vp}} \cdot (V^{\text{vap}} - V^{\text{liq}}) = 0. \quad (4.11)$$

Також існує ряд методів визначення тиску насиченої пари, які не використовують рівняння стану. Це рівняння Клайперона, кореляція Антуана, рівняння Ріделя, рівняння Лі-Кеслера, рівняння Фроста-Колкуорфа-Тодоса, рівняння Ріделя-Планка-Міллера [1].

Як тиск у двофазній області використовується тиск насиченої пари, знайдений по методиці Лі-Кеслера [2]. Перевагами рівняння Лі-Кеслера та Пітцера є більш точний розв'язок в широкому діапазоні двофазної області чистих речовин, рівняння має простішу форму, незважаючи на двопараметричний кореляційний вигляд, не вимагає наявності великої кількості коефіцієнтів, як у рівнянні Ріделя -Колкуорфа-Тодоса і не має табличних констант, індивідуальних для різних речовин, як у рівнянні Антуана [3].

Метод Лі-Кеслера та Пітцера заснований на використанні принципу відповідних станів і складається з наступних рівнянь:

$$\ln P_{vp_r} = f^{(0)}(Tr) + \omega f^{(1)}(Tr), \quad (4.12)$$

де ω - коефіцієнт ацентричності;

Tr - відношення розрахункової температури до критичної.

Функції $f(0)$ і $f(1)$ розкладання Пітцера представлені в широких інтервалах наведеної температури та представлені Лі та Кеслером у наступній аналітичній формі:

$$f^{(0)} = 5.92714 - \frac{6.09648}{Tr} - 1.28862 \ln Tr + 0.169347 Tr^6, \quad (4.13)$$

$$f^{(1)} = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tr} - 13.4721 \ln Tr + 0.43577 Tr^6. \quad (4.14)$$

За рівнянням Пітцера визначається вторинний тиск насиченої пари. Справжнє значення знаходиться як

$$P_{vp} = P_{vp_r} \cdot P_{cr}, \quad (4.15)$$

де P_{cr} – тиск робочого тіла у критичній точці.

Як базові дані, необхідні для валідації використаного методу, обрано програму mini-REFPROP. Mini-REFPROP – безкоштовний та скорочений зразок повної версії програми NIST REFPROP. Програма розроблена The National Institute of Standards and Technology (NIST), розраховує термодинамічні властивості лише чистих речовин. Для розрахунку використовують найбільш точні та близькі до експериментальних даних моделі. Для CO₂ mini-REFPROP використовується модель Спана-Вагнера [4], яка описує робочу функцію CO₂ з високою точністю. Рівняння Спана-Вагнера успішно використовується в 1D моделюванні, наприклад, для розрахунку техніки в лабіринтних ущільненнях [5]. Однак модель Спана-Вагнера має недоліки для практичного застосування в обчислювальній гідродинаміці 3D-розрахунків: вона вимагає великої кількості часу на обчислення та визначення термодинамічних взаємозв'язків. Математична модель, заснована на використанні двопараметричного рівняння стану, вимагає меншої кількості розрахункового часу та використання меншої кількості допоміжних параметрів та коефіцієнтів. На рис. 4.4 представлено відносне відхилення значення тиску насиченої пари, визначених за різними рівняннями, до експериментального результату. Як видно з графіків, представлених на рисунку, рівняння Душека [6] дає найближчий до експериментального результат. Похибка росте лише поблизу критичної точки.

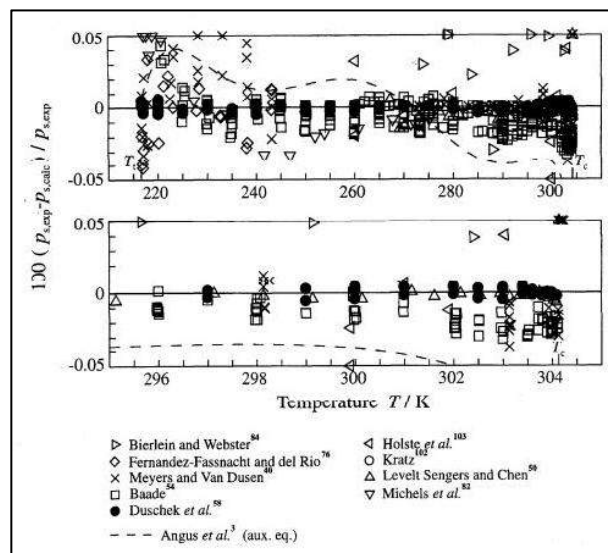


Рис. 4.4. Відносне відхилення значення тиску насиченої пари, визначених за різним рівнем, до експериментального результату [6]

Об'єми газової рідкої фази можна знайти декількома найпростішими способами: визначення об'ємів газової та рідкої фази з кореляційних рівнянь, оснований на експериментальних даних; визначення об'ємів шляхом розв'язання двопараметричного рівняння стану.

Для розв'язання кореляційних рівнянь немає необхідності використовувати значення тиску насиченої пари. Наприклад [7], у представлених рівняннях для CO₂ густина обох фаз якого залежить тільки від зазначеної температури (4.16), (4.17):

$$\rho_{liquid} = (0.466 + 0.466 (1.9073793 (1-T_r)^{0.347} - 0.38225 (1-T_r)^{0.6667} + 0.42897885 (1-T_r))) \quad (4.16)$$

$$\rho_{gas} = (0.466 + 0.466 (-1.7988929 (1-T_r)^{0.347} - 0.71728276 (1-T_r)^{0.6667} + 1.7739244 (1-T_r))) \quad (4.17)$$

Подібні кореляційні рівняння дають у межах заданого збіг з експериментальними даними, проте емпіричні коефіцієнти індивідуальні для різних речовин. Найбільш універсальним методом знаходження об'ємів чи густини є застосування двопараметричних рівнянь стану.

Загальний вигляд моделі Редліха-Квонга-Анг'є, записаного відносно об'єму, представлено у наступних рівняннях:

$$V^3 + a_1 V^2 + a_2 V + a_3 = 0, \quad (4.18)$$

$$a_1 = -(c + \frac{RT}{P}) \quad (4.19)$$

$$a_2 = -(b' b_0 + \frac{RT b_0}{P} - \frac{a(T)}{P})$$

$$a_3 = -\frac{a(T) b'}{P}$$

$$a(T) = \left(\frac{T_{cr}}{T} \right)^n$$

$$n = 0.4986 + 1.1735\omega + 0.475\omega^2$$

$$b_0 = 0.08664 \frac{RT_{cr}}{P_{cr}}$$

$$c = \frac{RT_{cr}}{P_{cr} + \frac{a}{V_{cr}(V_{cr} + b_0)}} + b_0 - V_{cr}$$

$$b' = b_0 - c$$

де R - газова стала для конкретної речовини;

T – поточне значення температури;

ω – коефіцієнт ацентричності;

P – поточне значення тиску (у двофазній області використане як тиск насиченої пари);

T_{cr} – критична температура речовин;

P_{cr} – критичний тиск речовин;

V_{cr} – критичний обсяг речовини.

Кубічне рівняння можна отримати методом Кардано-Вієта. У результаті рішення знайдено три кореня рівняння. З них найбільший – об'єм газового середовища, найменший – об'єм рідкого середовища. У програмі mini-REFPROP, яка використовується як експериментальна база, об'єм газової фази знаходиться з рівняння стану Спана-Вагнера. Модель Спана-Вагнера заснована на енергії Гельмгольца й виглядає так:

$$A(\rho, T)/(RT) = \varphi(\delta, \tau) = \varphi^0(\delta, \tau) + \varphi^r(\delta, \tau), \quad (4.20)$$

де δ – зазначена густина,

τ – зазначена температура.

Індекси 0 та r описують ідеальну частину рівняння енергії Гельмгольца та залишкову частину відповідно. Модель Спана-Вагнера описує робочу область CO₂ з достатньою точністю відповідно до експериментальних результатів і дозволяє використовувати модель як базу для валідації об'ємів газової та рідкої фази, отриманих з рівняння Редліха-Квонга-Анг'є.

Двопараметричні рівняння, зручні для практичного застосування в обчислювальній гідродинаміці, показують об'єм рідкої фази в двофазному середовищі зі значною похибкою. У зв'язку з цим прийнято рішення щодо визначення об'єму рідкої фази з використанням рівняння Ямади-Ганна [8]. Це рівняння є кореляційним, проте може використовуватися для різних неполярних і слабополярних речовин. Отримані за його допомогою результати збігаються з експериментальними даними поблизу лінії насичення.

$$V_{liquid} = V_{cr} \left(0.29056 - 0.08775 \omega \right)^{1 - \frac{T}{T_c} \frac{2}{7}} \quad (4.21)$$

Густина насичення для CO₂ знаходиться за рівнянням Душека

$$\ln \frac{\rho_{liquid}}{\rho_{cr}} = \sum_{i=1}^4 a_i \left(1 - \frac{T}{T_{cr}} \right)^{t_i}, \quad (4.22)$$

де T_{cr} – критична температура;

ρ_{cr} – критична густина;

a - емпіричні коефіцієнти: $a_1 = 1.9245108$, $a_2 = -0.62385555$, $a_3 = -0.32731127$, $a_4 = 0.39245142$

t - емпіричні коефіцієнти: $t_1=0.34$, $t_2=1/2$, $t_3=10/6$, $t_4=11/6$.

Результати розрахунків за методом Душека відповідають експериментальним даним, наведеним на рис. 4.5.

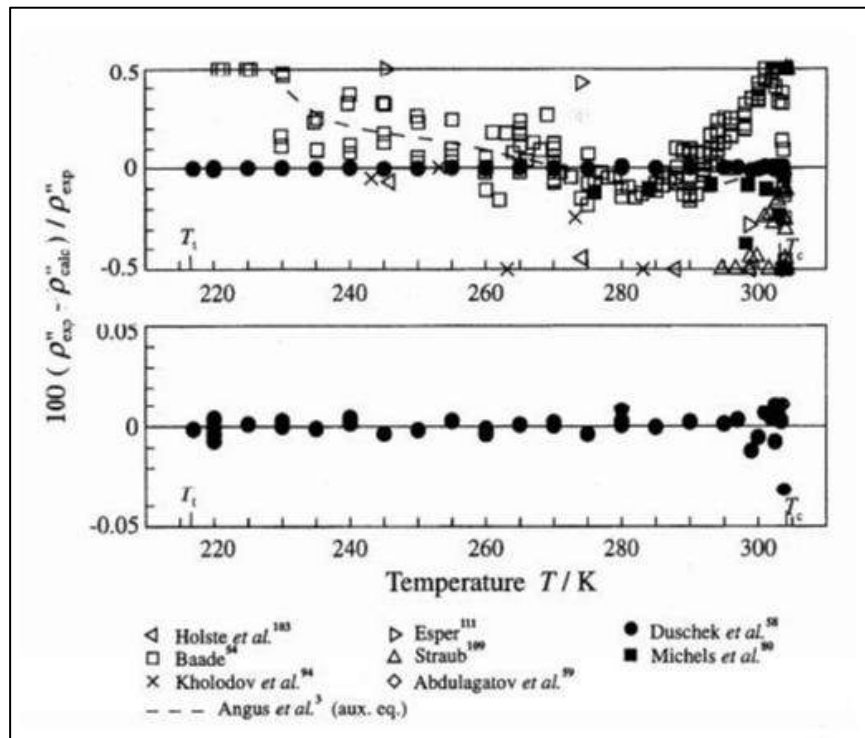


Рис. 4.5. Відносне відхилення значення густини насичення, визначених за різними рівняннями, до експериментального результату [6]

Як видно із залежностей на рис. 4.6, метод Душека має у межах заданого збіг з експериментальними значеннями і може використовуватися далі для валідації методу Ямади-Ганна.

Визначення ступеня сухості CO₂ на двофазній ділянці в температурному режимі від 220K до 300K

Ступінь сухості легко знайти за допомогою визначених раніше об'ємів газової та рідкої фаз:

$$Quality = \frac{\rho_{gas} \rho_{liquid}}{\rho (\rho_{liquid} - \rho_{gas})} - \frac{\rho_{gas}}{(\rho_{liquid} - \rho_{gas})}, \quad (4.23)$$

де густина газової та рідкої фаз визначається як

$$\rho_{liquid} = \frac{1}{V_{liquid}}, \quad (4.24)$$

$$\rho_{gas} = \frac{1}{V_{gas}}$$

Чисельне порівняння базових показників тиску насиченої пари, взятих з mini-REFPROP, та отриманих методом Лі-Кеслера та Пітцера у двофазній області, показує у межах заданого збіг (відносна похибка менше 1%). Крім того, з базовими значеннями, визначеними за допомогою mini-REFPROP, порівняно значення тиску насиченої пари, отримані за методом рівності площ по Максвеллу. Результати представлені на рис. 4.6 та у табл. 4.1.

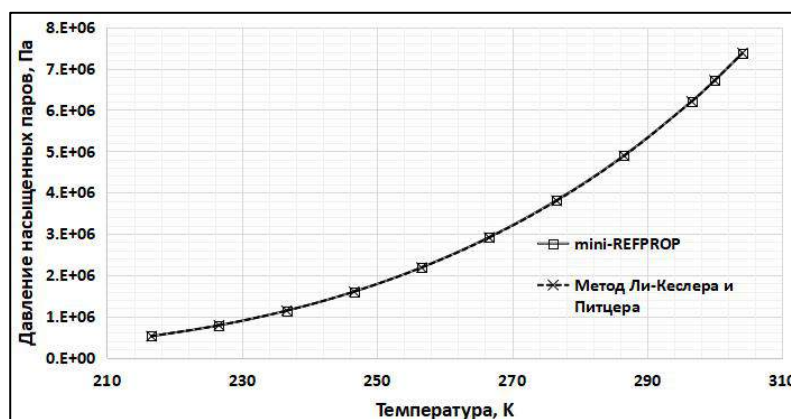


Рис. 4.6. Валідація методу Лі-Кеслера та Пітцера з базовими даними, визначеними за допомогою mini-REFPROP

Чисельне порівняння об'ємів газової фази, визначених із рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, за методом рівності площ Максвелла та базові знання, отримані за допомогою mini-REFPROP, представлено на рис. 4.7 та у табл. 4.1.

Таблиця 4.1. Чисельне порівняння результатів для тиску насиченої пари, визначених за методом Лі-Кеслера, за методом рівності площ Максвелла та базових даних з міні- REFPROP

	Спосіб 1. Лі-Кеслера	Спосіб 2. Максвелл	NIST RefPROP	Відносна похибка P_{vp} , %	
T, K	P_{vp} , Па	P_{vp} , Па	P_{vp} , Па	Спосіб 1	Спосіб 2
217	528171	-	527220	0.18	-
227	796063	-	795480	0.07	-
237	1153925	-	1154500	-0.05	-
247	1618174	-	1621400	-0.20	-
257	2206510	2206000	2213800	-0.33	-0.35
267	2938749	2938700	2950900	-0.41	-0.41
277	3838181	3838200	3853900	-0.41	-0.41
287	4933538	4933500	4947800	-0.29	-0.29
297	6261773	6261800	6266000	-0.07	-0.07
304	7355718	-	7355500	0.00	-

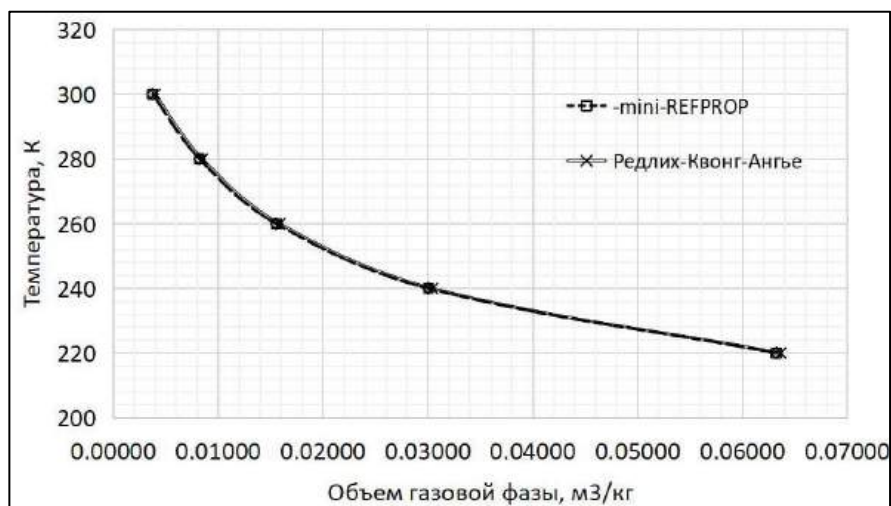


Рис. 4.7. Валідація моделі Редліха-Квонга-Анг'є з базовими даними, отриманими за допомогою міні-REFPROP для газової фази

Таблиця 4.2. Чисельне порівняння результатів для значення обсягу газової фази двофазної області CO₂

	Спосіб 1. Лі-Кеслера	Спосіб 2. Максвелл	NIST RefPROP	Відносна похибка P _{vp} , %	
T, К	Об'єм газового середовища	Об'єм газового середовища	Об'єм газового середовища	Спосіб 1	Спосіб 2
217	7.19E-02	-	7.15E-02	0.60	-
227	4.85E-02	-	4.81E-02	0.86	-
237	3.38E-02	-	3.34E-02	1.18	-
247	2.41E-02	-	2.37E-02	1.57	-
257	1.74E-02	1.75E-02	1.71E-02	2.05	2.37
267	1.28E-02	1.28E-02	1.24E-02	2.57	2.57
277	9.35E-03	9.31E-03	9.05E-03	3.23	2.81
287	6.74E-03	6.69E-03	6.48E-03	4.04	3.21
300	4.60E-03	3.72E-03	4.36E-03	5.50	-14.72

Як видно з Табл. 4.2, похибка між базовими даними та значеннями, визначеними з рівняння стану Редліха-Квонг-Анг'є, зростає при наближенні до навіколокритичної області. Температурні зміни від температури T=216,59 К до температури 220 К і від температури 300 К до критичної точки (T=304.13 К) не розглядаються. Для уточнення значення об'ємів газової фази в аналізованому температурному діапазоні, в рівняння коефіцієнта A(T) моделі Редліха-Квонга-Анг'є була введена масштабна поправка n_{2p}. Розподіл значень масштабної поправки для температурної зони від 2220 К до 300 К наведено на рис. 4.8. Модифікацію коефіцієнта рівняння A(T) наведено нижче:

$$A(T) = a \frac{T_{cr}}{T} \left(\frac{n}{n-2} \right)^{p}, \quad (4.25)$$

де масштабна поправка n_{2p} представлена у вигляді кореляційного рівняння та має вигляд

$$n_{2p} = -3.416687 + 0.029098 T + 0.0002418 T^2 - 2.86799 E - 06 T^3 + 9.3607 E - 09 T^4 - 1.0205347 E - 11 T^5 \quad (4.26)$$

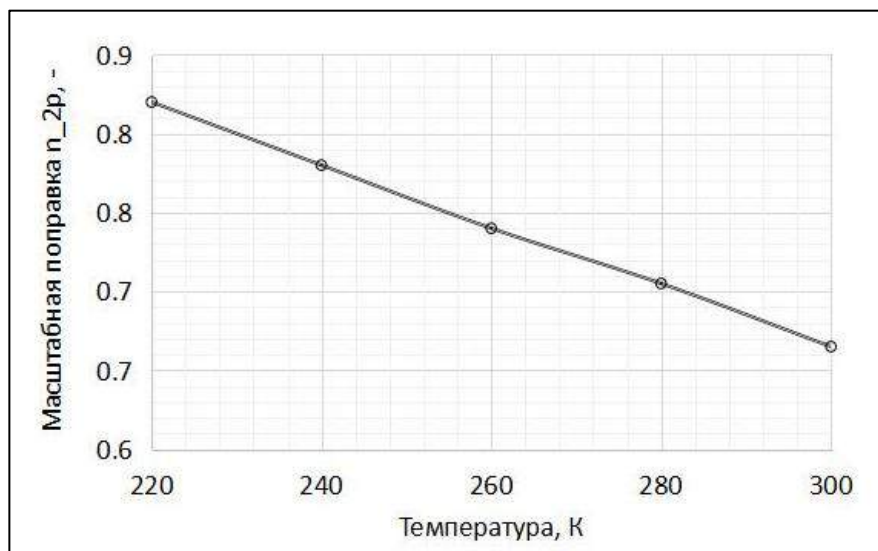


Рис. 4.8. Розподіл значення масштабної поправки n_{2p} у температурному діапазоні від 220 К до 300 К

Чисельне порівняння базових даних для об'ємів газової фази з модифікованим рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є представлено в табл. 4.3. Оцінка змін похибок на досліджуваному температурному режимі представлена на рис. 4.9 для оригінального та модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є.

Таблиця 4.3. Чисельне порівняння результатів для значення об'єму газової фази двофазної області CO_2

	міні-REFPROP	Редліх-Квонг-Анг'є модифікація	
T, К	Об'єм газової фази, м ³ /кг	Об'єм газової фази, м ³ /кг	похибка, %
220	0,06322	0,06324	0,03
240	0,03003	0,03005	0,04
260	0,01552	0,01553	0,03
280	0,00821	0,00821	0,01
300	0,00372	0,00373	0,05

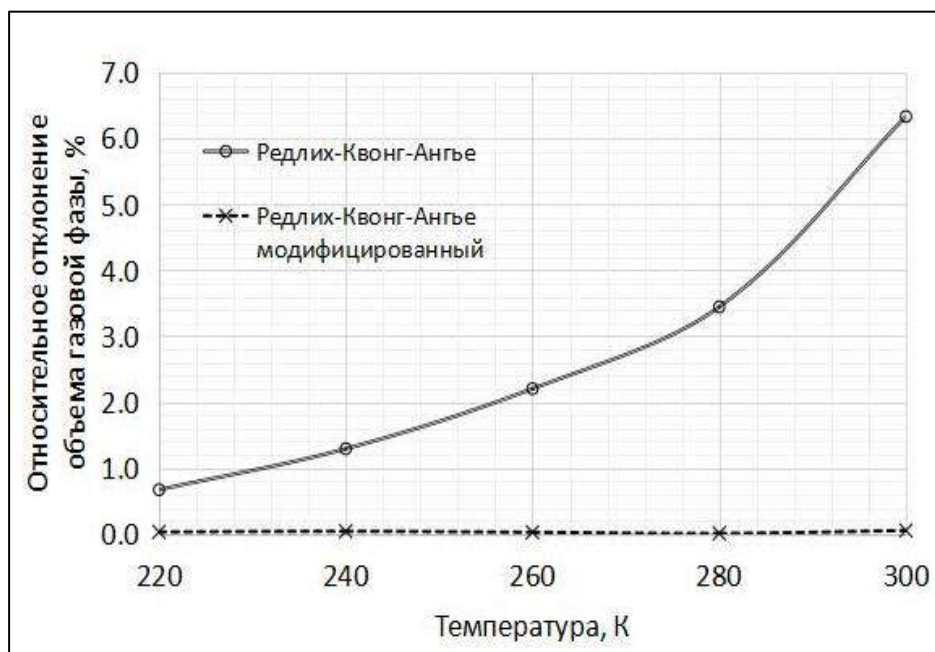


Рис. 4.9. Відносні відхилення об'ємів газової фази від базових значень для оригінального та модифікованого рівнянь стану Редліха-Квонга-Анг'є

Як видно з табл. 4.3 і рис. 4.9, введення масштабної поправки p_{2r} у рівняння Редліха-Квонга-Анг'є суттєво вплинуло на похибку в досліджуваному температурному діапазоні, що дозволило знизити похибку при визначенні коефіцієнта сухості.

У табл. 4.3 наведено порівняння для значень, визначених за оригінальним і модифікованим рівняннями Редліха-Квонга-Анг'є з базовими даними, отриманими за допомогою mini-REFPROP.

Підбір нової масштабної поправки для рідкої області не є доцільним, оскільки це призведе до додавання нових коефіцієнтів у модель Редліха-Квонга-Анг'є. Для визначення об'єму рідкої фази двофазної області може використовуватися рівняння Ямади-Ганна. У табл. 4.4 наведено порівняльні результати для цього методу.

Таблиця 4.4. Чисельне порівняння результатів для визначення об'єму рідкої фази в двофазній області CO₂

	mini- REFPROP	Редліх-Квонг- Анг'є		Редліх-Квонг- Анг'є модифікація	
T, К	Об'єм слабкої фази, м ³ /кг	Об'єм рідкої фази, м ³ /кг	Похибка, %	Об'єм рідкої фази, м ³ /кг	Похибка, %
220	0.00086	0.00092	6.94	0.00090	4.39
240	0.00092	0.00100	8.56	0.00097	5.09
260	0.00100	0.00112	11.44	0.00107	6.88
280	0.00113	0.00132	16.56	0.00125	10.88
300	0.00147	0.00186	26.35	0.00177	20.17

Таблиця 4.5. Чисельне порівняння результатів для визначення об'єму рідкої фази в двофазній області CO₂

	mini- REFPROP	Редліх-Квонг- Анг'є модифікація		Ямада-Ганн	
T, К	Об'єм рідкої фази, м ³ /кг	Об'єм рідкої фази, м ³ /кг	Похибка, %	Об'єм рідкої фази, м ³ /кг	Похибка, %
220	0.00086	0.00090	4.39	0.00087	0.92
240	0.00092	0.00097	5.09	0.00093	0.82
260	0.00100	0.00107	6.88	0.00101	0.67
280	0.00113	0.00125	10.88	0.00114	0.32
300	0.00147	0.00177	20.17	0.00145	-0.89

На рис. 4.10 представлено порівняння результатів для об'ємів рідкої фази, визначених за оригінальним і модифікованим рівнем Редліха-Квонга-Анг'є, а також методом Ямади-Ганна. Розрахункові результати порівняно з базовими значеннями, отриманими за допомогою mini-REFPROP. Метод Ямади-Ганна дає найкращий збіг з базовими значеннями.

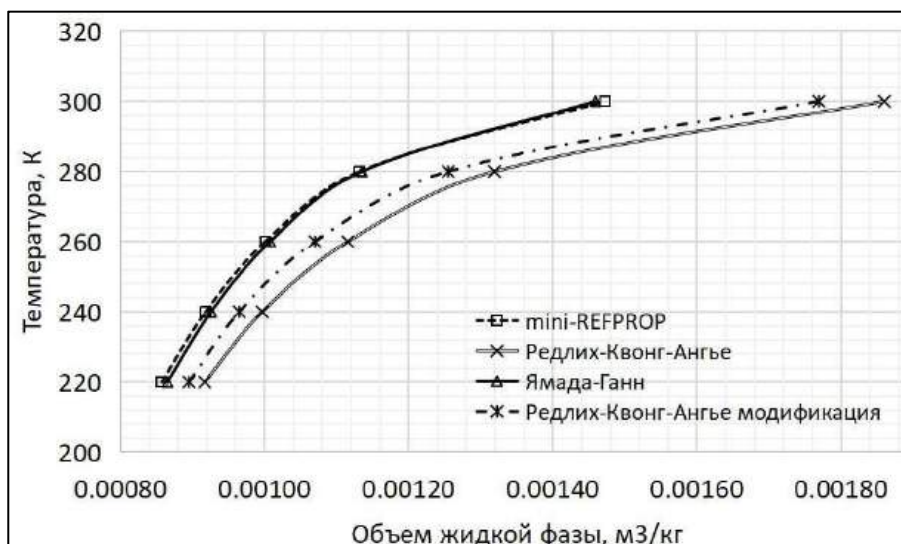


Рис. 4.10. Валідація моделі Редліха-Квонга-Анг'є та методу Ямади-Ганна з базовими даними, отриманими за допомогою mini-REFPROP для рідкої фази

Таким чином, для визначення об'єму газової фази в двофазній області краще використовувати модифікацію рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, а для знаходження об'єму рідкої фази – метод Ямади-Ганна. Іншими словами, при вирішенні модифікованого кубічного рівняння Редліха-Квонга-Анг'є значення найбільшого кореня буде відповідати об'єму газової фази, а для об'єму рідкої фази буде використовуватися метод Ямади-Ганна.

Нижче наведено графіки розподілу ступеня сухості в залежності від густини для всього досліджуваного температурного діапазону. На рис. 4.11 представлено значення ступеня сухості, для визначення яких використовувалося оригінальне рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є (для визначення об'ємів газової фази) та метод Ямади-Ганна (для визначення об'ємів рідкої фази).

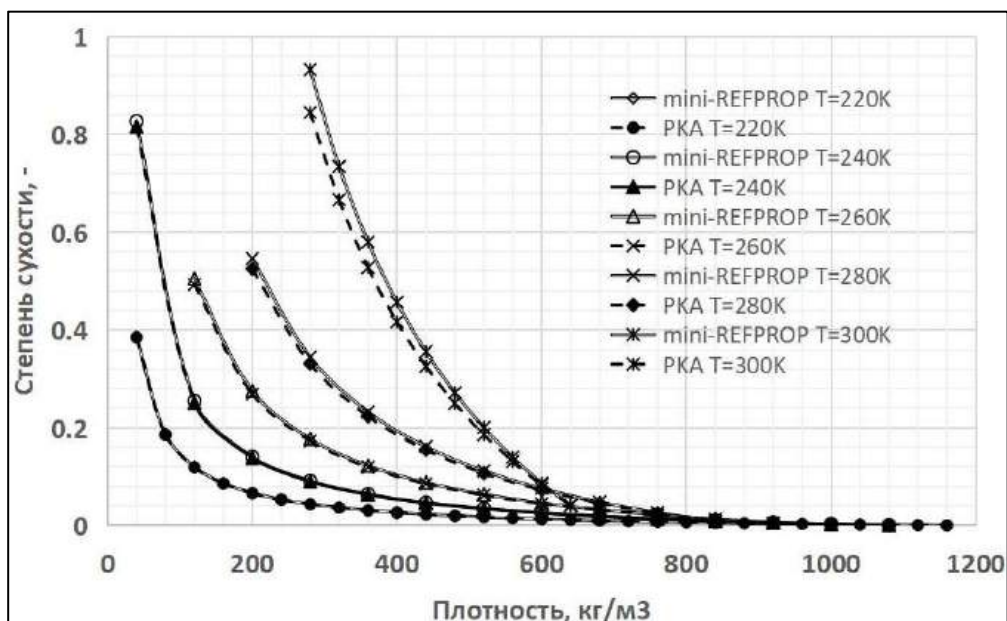


Рис. 4.11. Валідація оригінальної моделі Редліха-Квонга-Анг'є та методу Ямади-Ганна з базовими даними, отриманими за допомогою mini-REFPROP для ступеня сухості

Для детальнішого аналізу розглянемо розподіл похибок для математичної моделі, сформованої з використанням модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є та методики Ямади-Ганна залежно від густини (рис. 4.12).

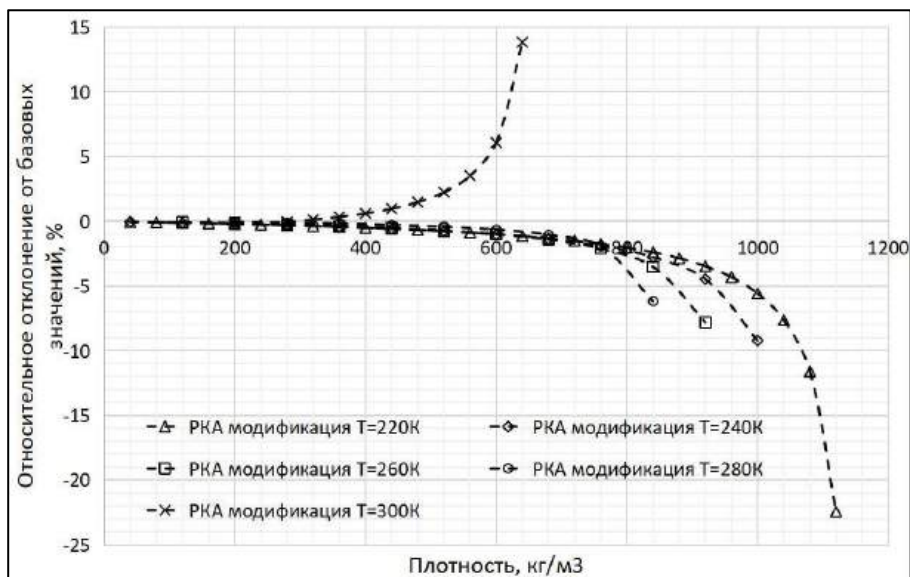


Рис. 4.12. Відносне відхилення від базового значення ступеня сухості, визначеного із використанням модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є

Рис. 4.12 демонструє малу похибку для густини від 40 кг/м^3 до 800 кг/м^3 для робочої температури від 220 К до 280 К . Похибка збільшується при наближенні термодинамічних властивостей CO_2 до лінії насичення (наближення ступеня сухості до нуля та ступеня вологості до 1 відповідно), особливо для температури, близької до температури потрійної точки (220 К), і навколокритичної температури (300 К). Лінія насичення є фазовим переходом першого роду та вимагає більш точного опису, ніж забезпечується математичною моделлю. Похибка для температури 300 К має інший тренд, відмінний від інших, представлених на графіку. Подібна поведінка може пояснювати ефекти, що відбуваються в навколокритичному регіоні, поблизу фазового переходу другого роду. Як і лінію насичення, область навколо критичної точки слід описувати точніше, ніж забезпечується математичною моделлю. Проте слід зазначити, що запропонована в цій роботі математична модель з достатньою точністю описує більшу частину температурного простору в широкій області зміни густини. Для коректного переходу через лінію насичення без великої похибки для солвера рівняння, використані для двофазної області, використовуються також на 20 К від лінії насичення в області рідкого стану та на 5 К від лінії насичення в області газоподібного стану.

4.1.3 Математичне моделювання робочого тіла в області рідкого стану

Якщо рівень вологості більше 1 і поточна температура нижче критичної, то робоче тіло знаходиться в чистій рідкій фазі.

Вихідні дані для рідкої області:

- критичні властивості: тиск, температура, густина, об'єм;
- масштабове виправлення для коефіцієнта $A(T)$;
- параметр зсуву для тиску та об'єму слабкої фази;
- коефіцієнти ацентричності;
- молярна маса, універсальна газова постійна;
- поточні значення температури та густини.

Тиск рідини можна використовувати за допомогою рівняння РКА. Вихідна форма двопараметричного рівняння стану Редліха-Квонга, модифікованого Анг'є, має вигляд

$$P = \frac{R T}{V - b + c} - \frac{A(T)}{V (V + b)}, \quad (4.27)$$

де

$$A(T) = a \frac{T_{cr}^n}{T}, \quad (4.28)$$

$$b = 0.08664 R T_{cr} / P_{cr},$$

$$c = \frac{R T_{cr}}{P_{cr} + \frac{a}{V_{cr} (V_{cr} + b)}} + b - V_{cr}$$

де R - постійна газова для конкретного робочого тіла; T – поточне значення температури; P – поточне значення тиску; $T_{кр}$ – критична температура робочого тіла; $P_{кр}$ - критичний тиск робочого тіла; $V_{кр}$ – критичний обсяг робочого тіла. Постійні a та b пов'язані з критичним тиском газу та критичною температурою. Константа c є поправкою для усунення відомої слабкості моделі Редліха-Квонга у критичній точці, де вона забезпечує коефіцієнт стійкості $1/3$. Оптимальне значення параметра n корелює Анг'є:

$$n = 0.4986 + 1.1735 \omega + 0.4754 \omega^2, \quad (4.29)$$

де ω - коефіцієнт ацентричності робочого тіла.

Метод, описаний нижче, може бути використаний для вирівнювання на основі густини, коли відомі значення температури та густини робочої рідини, а тиск знаходиться з рівняння стану.

Загалом рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є має схожу з експериментальними даними тенденцію розподілу ізотерм у кожній фазі діоксиду вуглецю. Цей факт дозволяє модифікувати рівень стану РКА для областей точного прогнозування, де

різниця між теоретичними результатами та базовими даними збільшується. В якості базових даних було обрано дані з програми mini-REFPROP.

Порівняння трендів ізотерм рідини для температури 280 К наведено на рис. 4.13. Розрахунок ізотерм «РКА», оснований на рівнянні стану Редліха-Квонга-Анг'є. "Базові дані" ізотерм взято з бази даних mini-REFPROP.

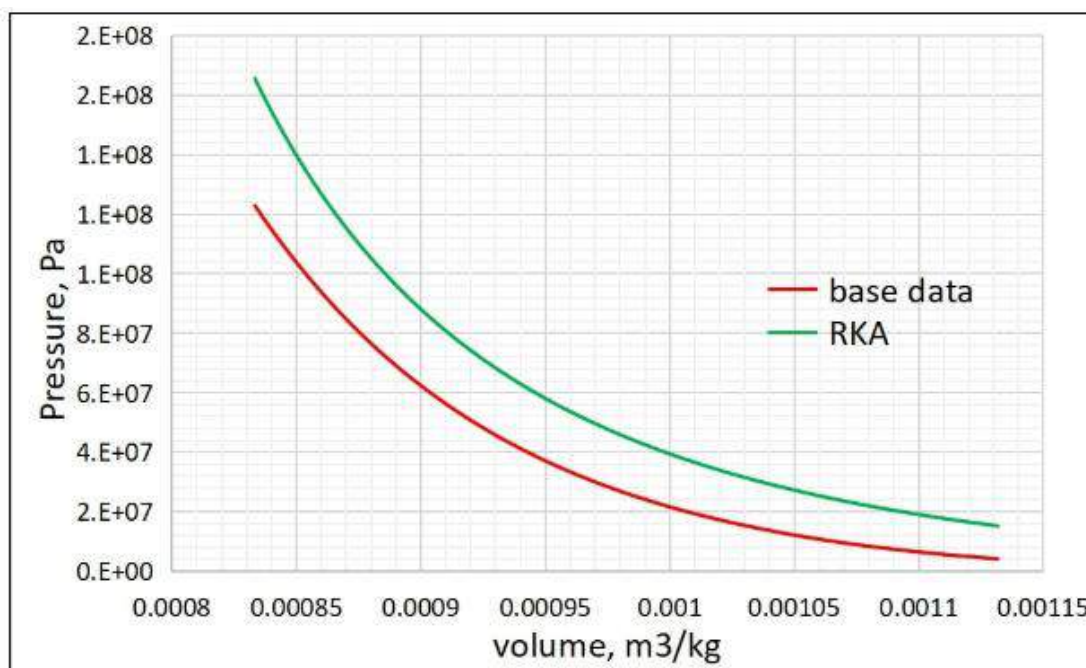


Рис. 4.13. Ізотерми рідини для рівняння стану РКА та для базових даних (mini-REFPROP). Температура 280 К

Для зменшення різниці між ізотермами рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є модифікується масштабним коефіцієнтом n_{liquid} , який включає коефіцієнт $A(T)$. Модифікований коефіцієнт $A(T)$ рідини можна знайти як

$$A(T)_{liquid} = a \frac{T_{cr}}{T}^{n_{liquid}/n} \quad (4.30)$$

Значення масштабного коефіцієнта n_{liquid} , визначеного в широкому діапазоні температури в області чистої рідини від мінімальної температури вуглекислого газу 216,59 К до критичної температури 300 К з кроком 20 К, представлено на рис. 4.14.

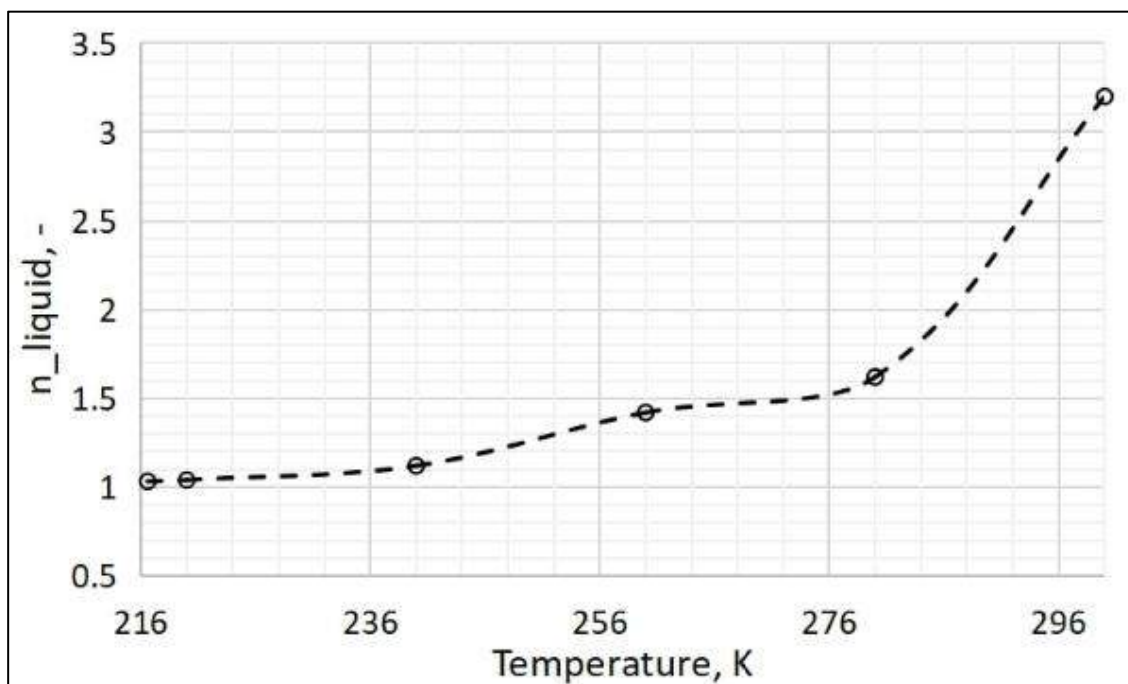


Рис. 4.14. Розподіл масштабного коефіцієнта n_{liquid}

Параметр $A(T)_{\text{liquid}}$ після модифікації зберігає аналогічний тренд, як і в оригіналі параметр $A(T)$ (рис. 4.15).

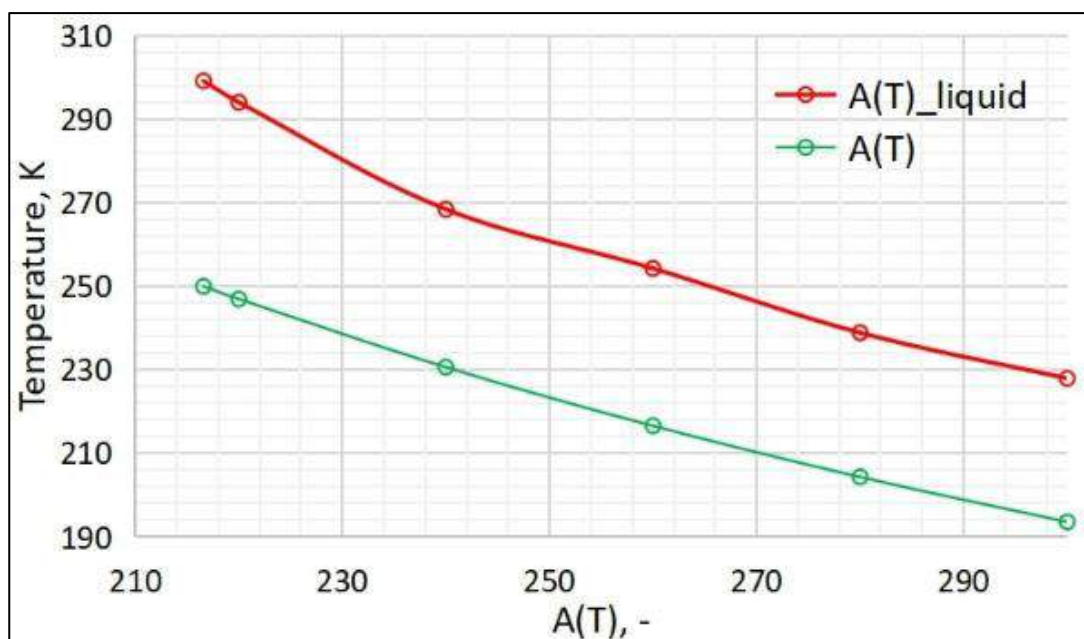


Рис. 4.15. Параметри вихідної $A(T)$ та модифікованої рідини $A(T)$

Оптимальне значення масштабного коефіцієнта n_{liquid} можна застосовувати для будь-якої температури від 216,59 до 300 К за допомогою емпіричних функцій

$$n_{liquid} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 + a_6 T^6, \quad (4.31)$$

де в рівнянні (4.31) $a_0 = -3.80666E+03$; $a_1 = 6.59754E+01$; $a_2 = -3.92603E-01$; $a_3 = 6.11597E-04$; $a_4 = 2.74395E-06$; $a_5 = -1.18587E-08$; $a_6 = 1.26942E-11$.

Ізотермічно модифіковане рівняння стану РКА наближається до базових даних, які відповідають температурі 280 К, як показано на рис. 4.16.

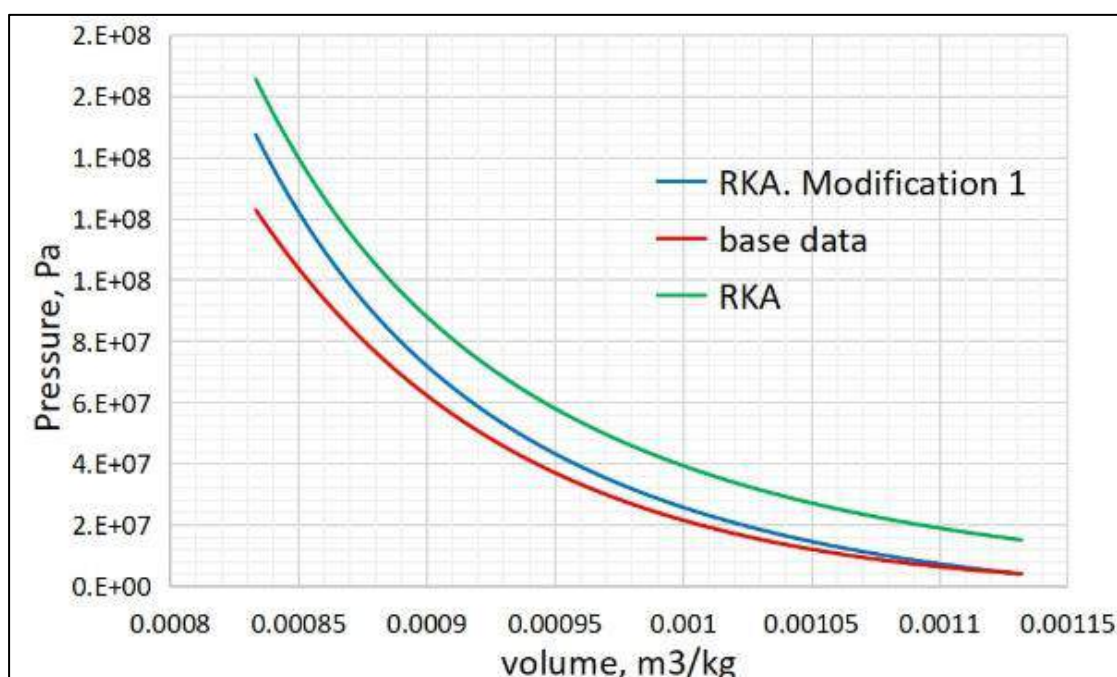


Рис. 4.16. Ізотермі рідини для РКА, для базових даних (mini-REFPROP) та для модифікованого за масштабним коефіцієнтом рівняння стану РКА. Температура 280К

Наступним кроком модифікації рівняння стану Редліха-Квонга-Анге є введення параметра зсуву для досягнення максимально близьких результатів розрахунку тиску рідини до базових даних. Тиск рідини та об'єм рідини, визначені на попередньому етапі модифікації, множаться на параметр зсуву α . Зсув-параметр тут відображає собою кут, на який ізотерму модифікованого РКА повертають ближче до базової ізотерми. Кутовий розподіл знайдено для широкого діапазону температур від мінімальної температури 216,59 К до критичної 300 К з кроком 20 К (рис. 4.17).

Параметр зсуву α можна знайти для будь-якої температури в інтервалі від 216,59 до 300 К:

$$\alpha = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 \quad (4.32)$$

де у рівнянні (4.32) $a_0 = -7.564 \text{E}+04$; $a_1 = 1.1807 \text{E}+03$; $a_2 = -6.8682$; $a_3 = 1.7656 \text{E}-02$; $a_4 = -1.6927 \text{E}-05$.

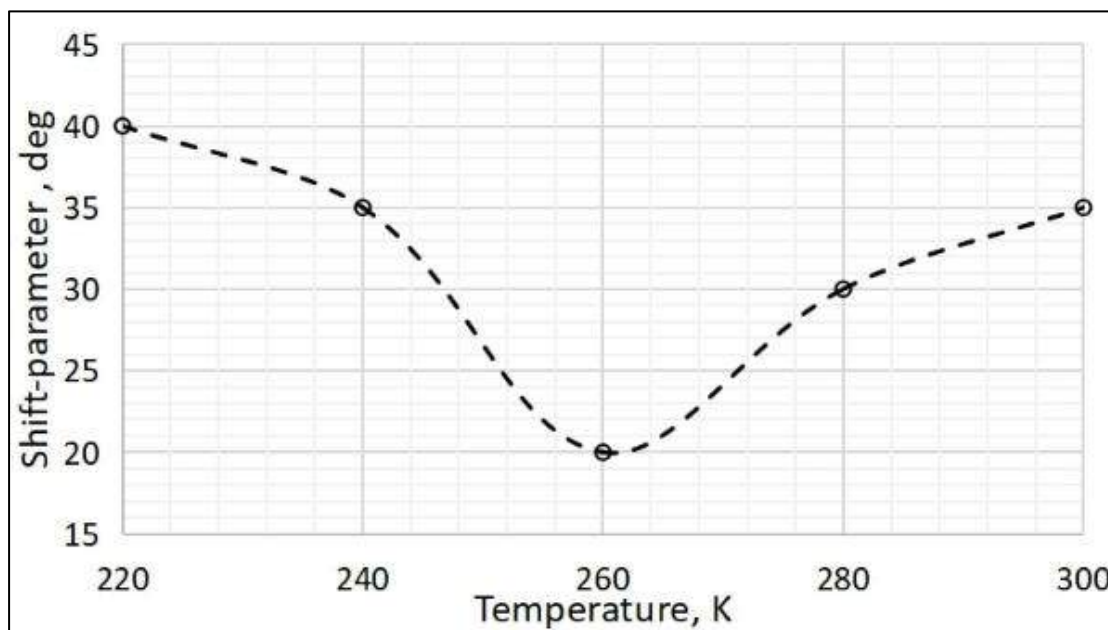


Рис. 4.17. Розподіл Shift-параметрів залежно від температури

Тиск рідини після модифікації рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є можна представити як

$$P = P_{\text{mod}} \cos(\alpha) + V \sin(\alpha), \quad (4.33)$$

де

$$P = \frac{R T}{V - b + c} - \frac{A(T)_{\text{liquid}}}{V (V + b)}, \quad (4.34)$$

P_{mod} – тиск рідини, який був визначений після першої модифікації рівняння РКА.

Вихідна ізотерма рівняння РКА, перша модифікація ізотерми рівняння РКА, друга модифікація ізотерми рівняння РКА та ізотерма базових даних представлені на рис. 4.18.

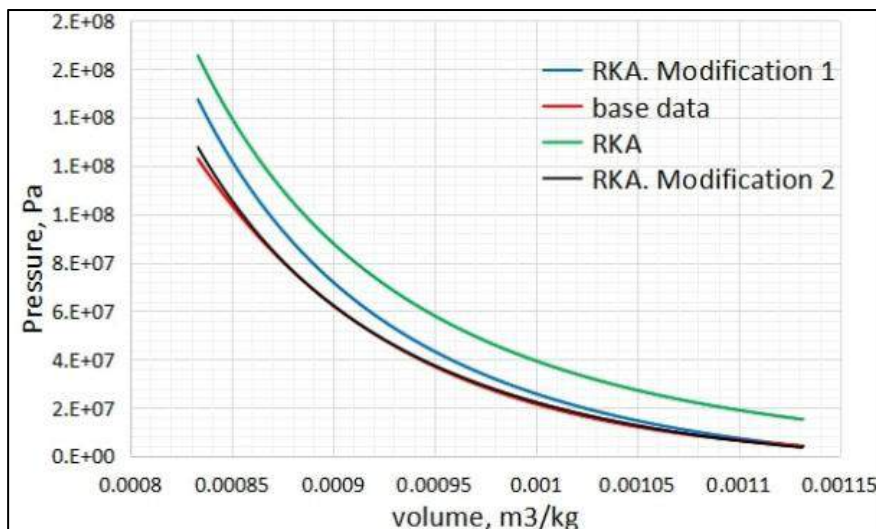


Рис. 4.18. Ізотермі рідини для вихідного РКА, для вихідних даних (mini-REFPROP), першої модифікації для ізотермі рівняння РКА (Модифікація 1), для другої модифікації для ізотермі рівняння РКА (Модифікація 2). Температура 280К

Друга модифікація рівняння Редліха-Квонга-Анг'є підтверджується базовими даними для температури від 220 К до 300 К для тиску рідини. Результати наведені нижче на рис. 4.19.

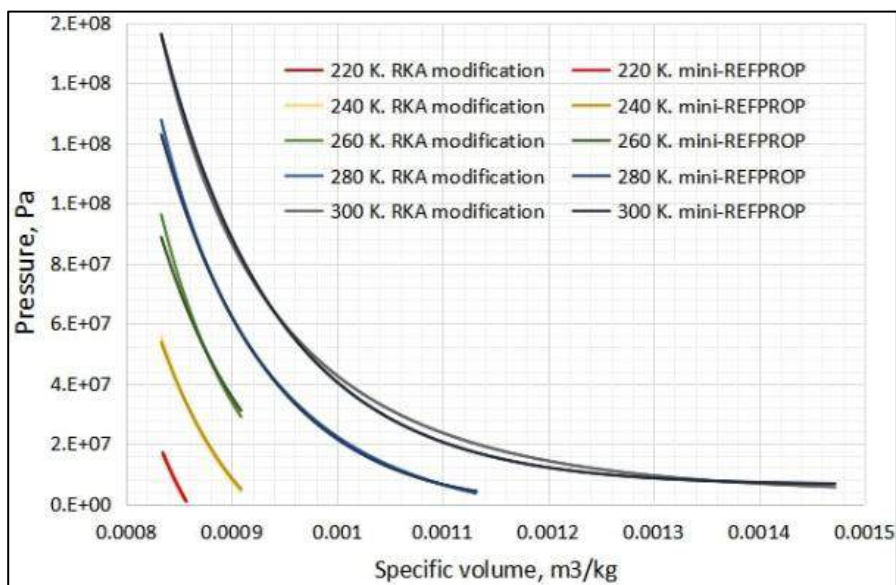


Рис. 4.19. Ізотермі рідини для другої модифікації рівняння РКА (Модифікація 2) та вихідних даних (mini-REFPROP). Температурний діапазон від 220 К до 300 К

Масштабний коефіцієнт n_{liquid} та параметр зсуву α здатні зменшити різницю між модифікованим рівнянням стану РКА і базовими даними для тиску рідкої фази - близько 3-25% похибки для області рідкого CO_2 від 220 до 300 К (рис. 4.20).

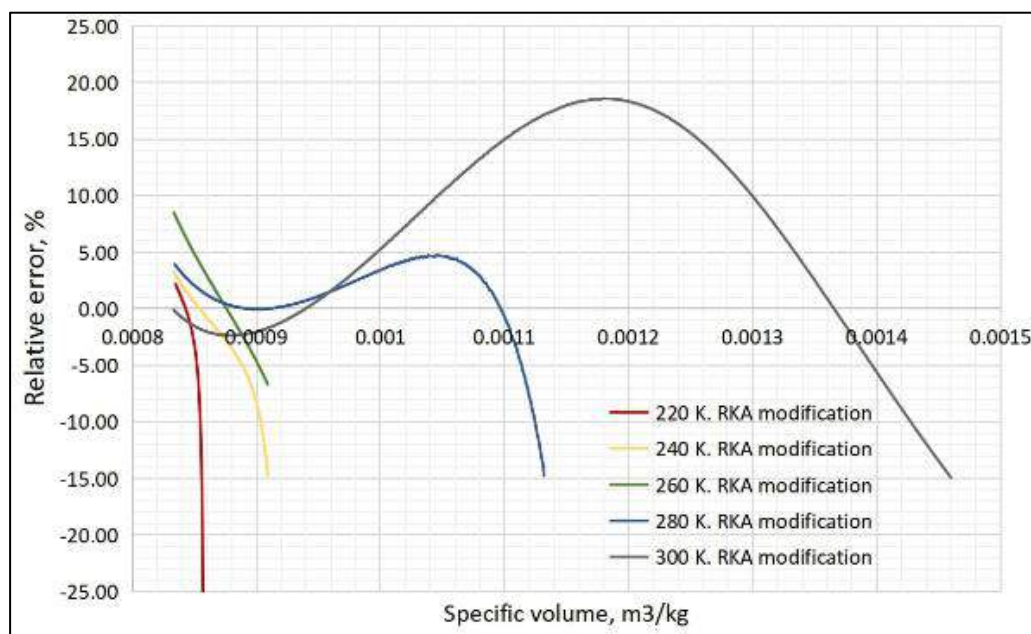


Рис. 4.20. Відносна похибка ізотерм рідини другої модифікації рівняння РКА (модифікація 2). Температурний діапазон від 220 К до 300 К

4.1.4 Математичне моделювання стану в області навколо критичної точки робочого тіла

Якщо поточна температура дорівнює критичній температурі, рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є доповнюється масштабним рівнянням стану для поправки за температурою та густиною. Як масштабове рівняння використовується класична функція гасіння флуктуацій густини та температури, характерних для критичної області.

Вихідні дані:

- поточні значення густини та температури;
- критичні властивості робочого тіла;
- емпіричні коефіцієнти для масштабного рівняння стану та функції ймовірності гасіння флуктуацій.

Визначення термодинамічних параметрів CO₂ в навіколокритичній області можна розділити на три етапи: визначення тиску із звичайної та масштабної частин рівняння стану, ентальпії та ентропії в навіколокритичній області. Як базові дані, необхідні для перевірки методу, були використані результати, отримані з використанням програми mini-REFPROP.

Метод 1. Визначення тиску з кросоверного рівняння в навіколокритичній області CO₂ з регулярними та масштабними частинами

1. Визначення тиску з регулярної частини кросоверного рівняння стану в навіколокритичній області CO₂

Тиск в області поблизу критичної точки можна знайти за допомогою рівняння РКА. Метод, описаний нижче, може бути використаний для вирівнювання на основі густини, коли відомі значення температури та густини робочої рідини, а тиск знаходиться з рівняння стану.

Як регулярна частина масштабного рівняння стану використовується вихідна форма двопараметричного модифікованого Анґ'є рівняння стану Редліха-Квонга.

Для отримання більш точних значень тиску в регулярній частині масштабного рівняння за аналогією математичної моделі з роботи [10] були додані параметри масштабування та зсуву. Оскільки діапазон температури від 300 К до 305 К містить декілька областей робочої ваги, двофазного та надкритичного, масштабовані параметри будуть індивідуальними для обох областей.

Масштабовані параметри можна знайти з кореляційних залежностей

$$n_{2_ph} = -3.9245E - 04 \ T^3 + 3.466E - 01 \ T^2 - 1.0196E + 02 \ T + 9.9872E + 03; \quad (4.35)$$

$$n_{scr} = 2.3259E - 05 \ T^4 - 2.7996E - 02 \ T^3 + 1.2625E + 01 \ T^2 - 2.528E + 03 \ T + 1.8964E + 05.$$

Модифіковане рівняння коефіцієнта A(T) представлено нижче:

$$A(T)_{2ph} = a \frac{T_{cr}}{T} \left(\frac{n_{2ph}}{n} \right) \quad (4.36)$$

$$A(T)_{scr} = a \frac{T_{cr}}{T} \left(\frac{n_{scr}}{n} \right),$$

де індекс 2ph означає параметри двофазної області, а scr - параметри надкритичної області.

Модифіковані коефіцієнти $A(T)_{2ph}$ та $A(T)_{scr}$ вибираються в рівнянні стану РКА замість вихідного виду коефіцієнта $A(T)$.

2. Визначення тиску з масштабної частини кросоверного рівняння стану в навіколокритичній області CO₂.

Фізична основа застосування масштабних рівнянь стану, як і в усій масштабній теорії, відбувається з урахуванням взаємодій розвинених флуктуацій у точці фазового переходу другого роду, що призводить до сингулярної поведінки термодинамічних похідних (зокрема, теплоємності) з незначними критичними показниками [11].

масштабове рівняння стану, представлене нижче, явно відображає залежність тиску від поправок на густину та температуру:

$$\frac{P_{scaled}}{P_{cr}} = 1 - k(q_p - q)^\gamma \Delta \rho |\Delta \rho|^{\delta-1} \left(1 + \frac{\delta}{1+\delta} \Delta \rho + \right. \quad (4.37)$$

$$+ k \left(dT + q_p |\Delta \rho|^{1/\beta} \right)^\gamma (\Delta \rho + \Delta \rho^2) -$$

$$- k dT |dT|^{\gamma-1} \Delta \rho^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma\beta}{1+2\beta} \frac{q_p |\Delta \rho|^{1/\beta}}{dT} + (M - a_p) dT \right)$$

Це рівняння містить три константи m , M -ар, k та критичні властивості робочого тіла, що робить рівняння зручнішим для використання. Значення критичних показників взяті з тривимірної моделі Ізінга [12], [13]: $\beta=0,3255$; $\gamma = 1,239$; $\delta=(\gamma+\beta)/\beta=4,806$. a_p – константа перетворення Покровського [14]. $q=(m/k)1/\gamma$ - коефіцієнт для граничної кривої (бінодалі) в критичній області.

$$\begin{aligned}dT &= \frac{(T - T_{cr})}{T_{cr}} \\ \Delta\rho &= \frac{(\rho - \rho_{cr})}{\rho_{cr}}, \\ q_p &= 4.0015 \cdot q\end{aligned}\tag{4.38}$$

де T і ρ – поточні значення температури та густини,

T_{cr} та ρ_{cr} – критичні параметри вуглекислого газу,

q_p – коефіцієнт кривої, що містить теплоємність C_v на S-спинодалі.

Суть масштабової гіпотези Відома полягає в тому, що відмінність хімічного потенціалу від потенціалу на критичній ізохорі при тій же температурі характеризується антисиметричною функцією, що проявляється простою комбінацією dT і $\Delta\rho$. Потенціал $\Delta\mu$, визначений Грином, Купером і Левельтом Сенгерсом [15], пропорційний різниці тиску рідини, хімічному потенціалу і температурі в точці з тими ж координатами, але на площині, що наповнює поверхню.

Регулярна частина рівняння стану (УС Редліха-Квонга-Анг'є), пов'язана з частиною рівняння стану, що масштабує, та з кросоверною функцією. Як кросоверну функцію між регулярною та масштабовою частинами використовують класичну функцію ймовірності погасання коливань температури та щільності:

$$Y = \exp(-\lambda \cdot dT^2 - \mu \cdot \Delta\rho^2),\tag{4.39}$$

де dT і $\Delta\rho$ характеризують відстані від критичних точок, а емпіричні коефіцієнти λ і μ відбивають вплив критичних флуктуацій.

масштабове рівняння має вигляд

$$\frac{P}{P_{cr}} = (1 - Y) \cdot P_{RKA} / P_{cr} + Y \cdot \frac{P_{scaled}}{P_{cr}},\tag{4.40}$$

де P_{RKA} – тиск, знайдений з регулярної частини (РКА УРС) масштабного рівняння,

P_{scaled} – тиск, знайдений з масштабного рівняння стану,

Y – кросоверна функція ймовірності згасання температури та коливання густини.

Аналіз рівнянь для температури і поправок на густину показав, що при досягненні критичних значень температури й густини поправки дорівнюють нулю.

У зв'язку з цим було прийнято рішення додати умови для досягнення критичних параметрів: поправки на температуру та густину, що відповідають вимогам $1E-05$, коли поточні температура й густина досягають параметрів критичної точки.

Метод 2. Визначення тиску за допомогою кросоверного рівняння стану в навіколокритичній області CO_2

Тиск на критичній ізохорі можна застосувати для статичної поведінки термодинамічної величини на вибраних кривих поблизу критичної точки.

$$\frac{(P - P_{cr})}{P_{cr}} = D_0 \cdot |\Delta\rho|^\delta, \quad (4.41)$$

де D_0 – критична ізотерма

$$D_0 = \frac{a}{k^\delta} \cdot (b^2 - 1) \cdot b^{\delta-3}, \quad (4.42)$$

$$b^2 = \frac{(\varphi - 2\beta)}{\varphi \cdot (1 - 2\beta)}.$$

Середні значення критичних параметрів можна знайти методом ренормалізації [16]:

$$\beta = 187/576 = 0.32465; \varphi = 119/96 = 1.23958; \delta = 53/11. \quad (4.43)$$

Дані кривої фазової рівноваги можна апроксимувати рівнянням:

$$|\rho - \rho_{cr}| = B_0 \cdot |\tau|^\beta, \quad (4.44)$$

$$\tau = \left(\frac{T - T_{cr}}{T_{cr}} \right),$$

$$\Delta\rho = \left(\frac{\rho - \rho_{cr}}{\rho_{cr}} \right).$$

Тиск у навіколокритичній області можна знайти як

$$\Delta P = \Delta \pi + c_1 \Delta T + D\mu, \quad (4.45)$$

де $c_1 = c_0 + c_2$ - безрозмірний нахил ізохори в критичній точці.

Потенціал $\Delta \pi$ має вигляд

$$\Delta \pi = r^{\beta(\delta+1)} q(\theta), \quad (4.46)$$

Функція $q(\theta)$ визначається шляхом розв'язання диференціального рівняння з [17]:

$$q(\theta) = I_0 + I_2 \theta^2 + I_4 \theta^4 + c(1 - b^2 \theta^2)^{2-\alpha}, \quad (4.47)$$

якщо $T \geq T_{cr}$ $c = P_0 - I_0$;

якщо $T < T_{cr}$ $c = P_{\pm} - I_{\pm}$

$$P_0 = \frac{A_0}{(1 - \alpha)(2 - \alpha)}, \quad (4.48)$$

$$P_{\pm} = A_{\pm} P_0 / A_0,$$

$$\frac{I_0}{K_0} = 1 - \frac{K_1}{b^2(1 - \alpha)} + \frac{2 \cdot K_2}{b^4 \cdot \alpha(1 - \alpha)},$$

$$\frac{I_2}{K_0} = \frac{K_1 \cdot (2 - \alpha)}{(1 - \alpha)} + \frac{2 \cdot K_2 \cdot (2 - \alpha)}{b^2 \cdot \alpha(1 - \alpha)},$$

$$\frac{I_4}{K_0} = - \frac{K_2 \cdot (2 - \alpha)}{\alpha},$$

$$I_{\pm} = (b^2 - 1)^{\alpha-2} (I_0 + I_2 + I_4),$$

$$K_0 = a \cdot \frac{g}{2b^2(2 - \alpha)},$$

$$g = B(b^2 - 1)^{\beta},$$

$$a = g/C_0,$$

Для розрахунку тиску із масштабними рівняннями при вибраному значенні ΔP та ΔT необхідно знати критичні константи рідини, критичні індекси, параметри $C1$, $A0$, $A\pm$, B та $C0$.

Функція перемикання $f(r)$ є зв'язок між аналітичним і масштабним рівняннями стану.

$$f(r) = 1 - \left[1 - \exp\left(-\left(\frac{k1}{r}\right)^{n1}\right) \right] \left[1 - \exp\left(-\left(\frac{k2}{r}\right)^{n2}\right) \right], \quad (4.49)$$

де $k2 > k1$ і $n2 > n1$. Тут перша дужка виконує більшу частину плавного перемикання, а друга, яка є більш крутою функцією r сильно зводить $(1-f)$ до нуля при $r \approx 5k1$.

$$p = f(r) \cdot P_{RKA\ mod} + [1 - f(r)] \cdot P_{scale}. \quad (4.50)$$

Як аналітичне рівняння обрано модель Редліха-Квонга-Анг'є з модифікацією Методу 1.

Результати для методу 1. Визначення тиску з масштабного рівняння стану в області CO_2 поблизу критичної точки з регулярними та масштабними рівняннями.

Аналіз розбіжності між базовими даними та значеннями, розрахованими за рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є у вихідній формі, показує суттєве збільшення похибки зі зростанням густини для всього температурного діапазону від 300 К до 305 К. Масштабовані параметри n_{2ph} і n_{scr} включені в рівняння коефіцієнта $A(T)$ моделі Редліха-Квонга-Анг'є для уточнення значного тиску у всій температурі. Ця модифікація РКА була включена в масштабове рівняння стану і було уточнено для широкого діапазону густини і температури, а результати масштабного рівняння були близькі до базових даних. Візуалізація ізотерм показує аналогічні тенденції для масштабованого рівняння стану та базових даних, за винятком ізотерм для 305К.

Результати перевірки методу наведено нижче на рис. 4.21 – 4.25.

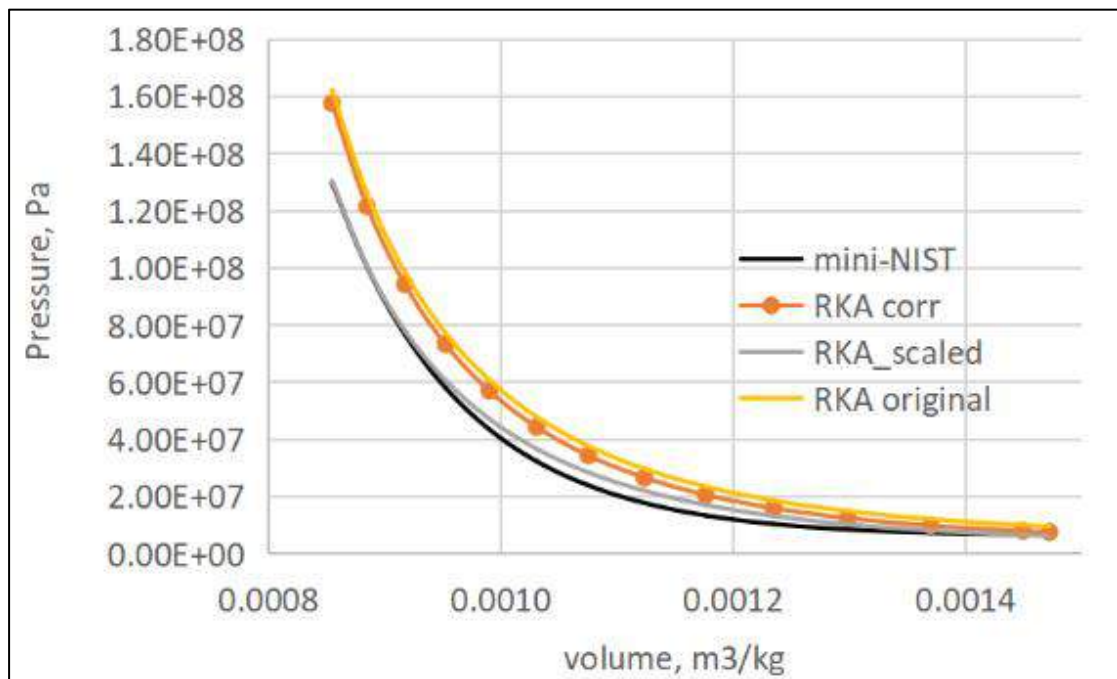


Рис. 4.21. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 300 К

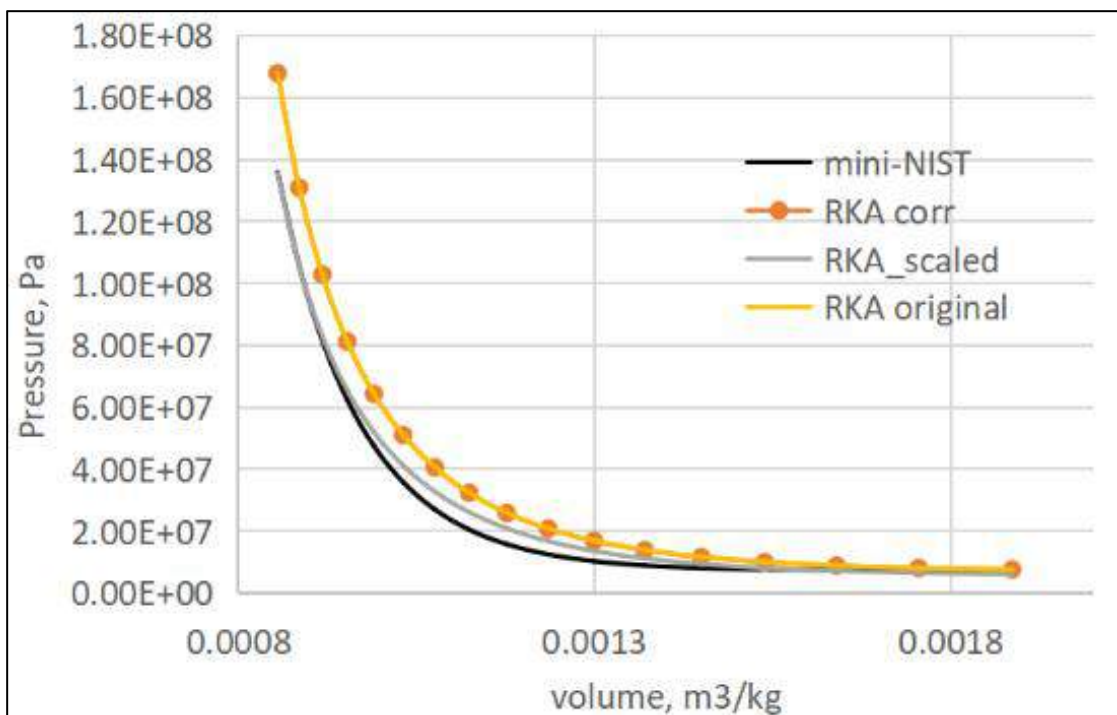


Рис. 4.22. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 304 К

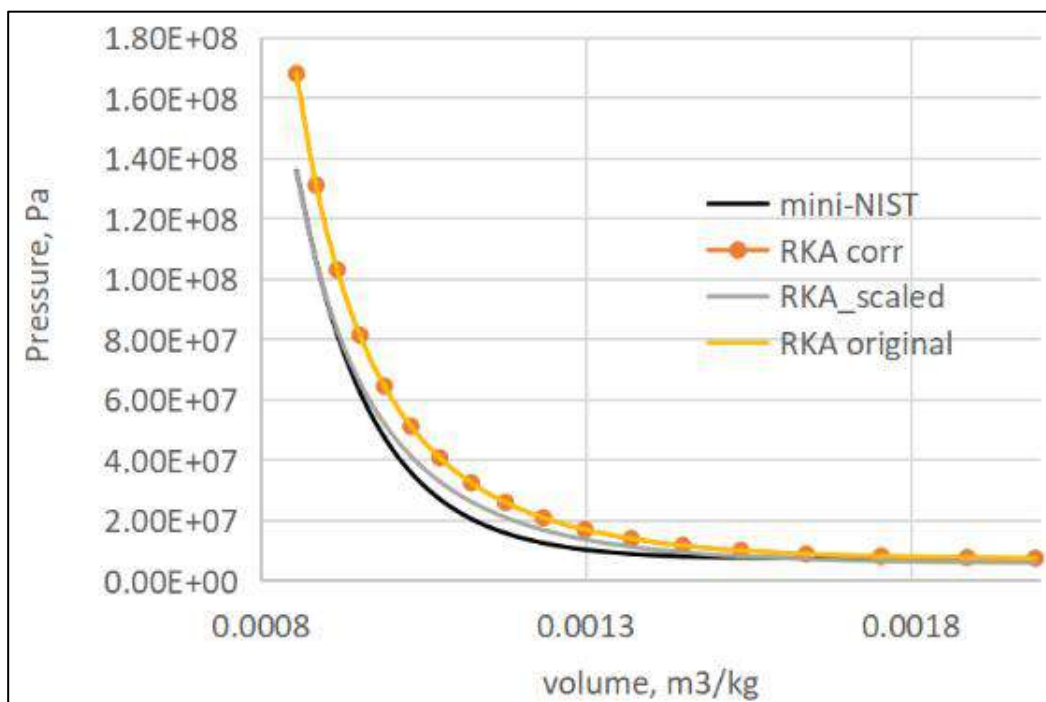


Рис. 4.23. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 304,11 К

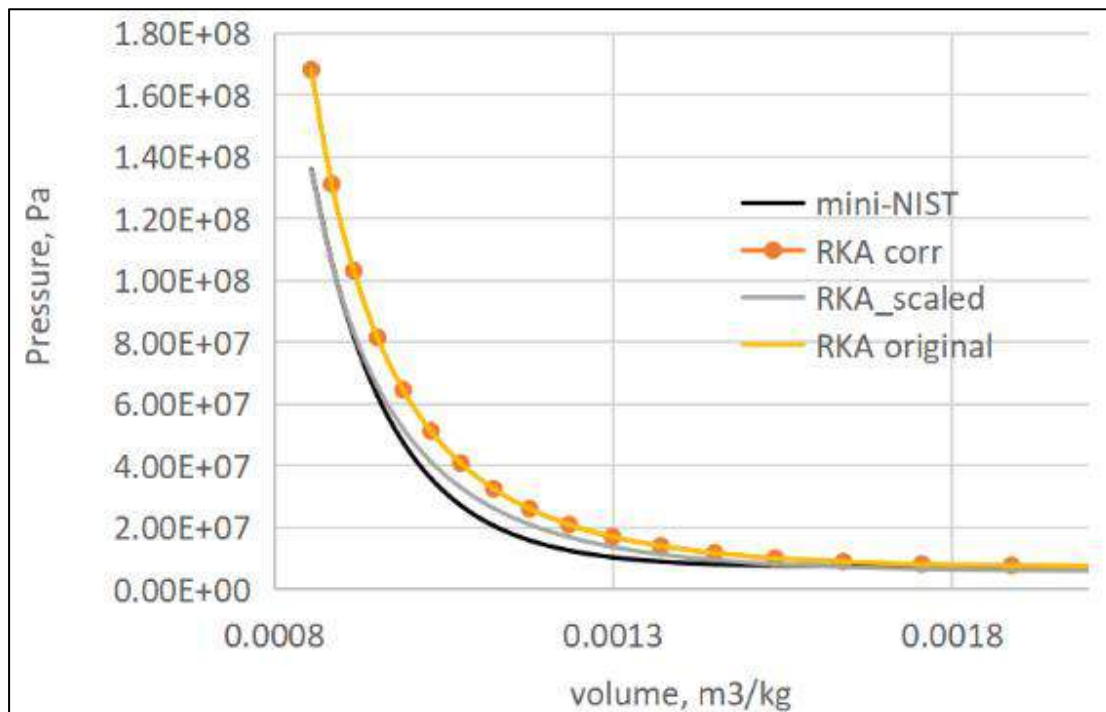


Рис. 4.24. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 304,13 К

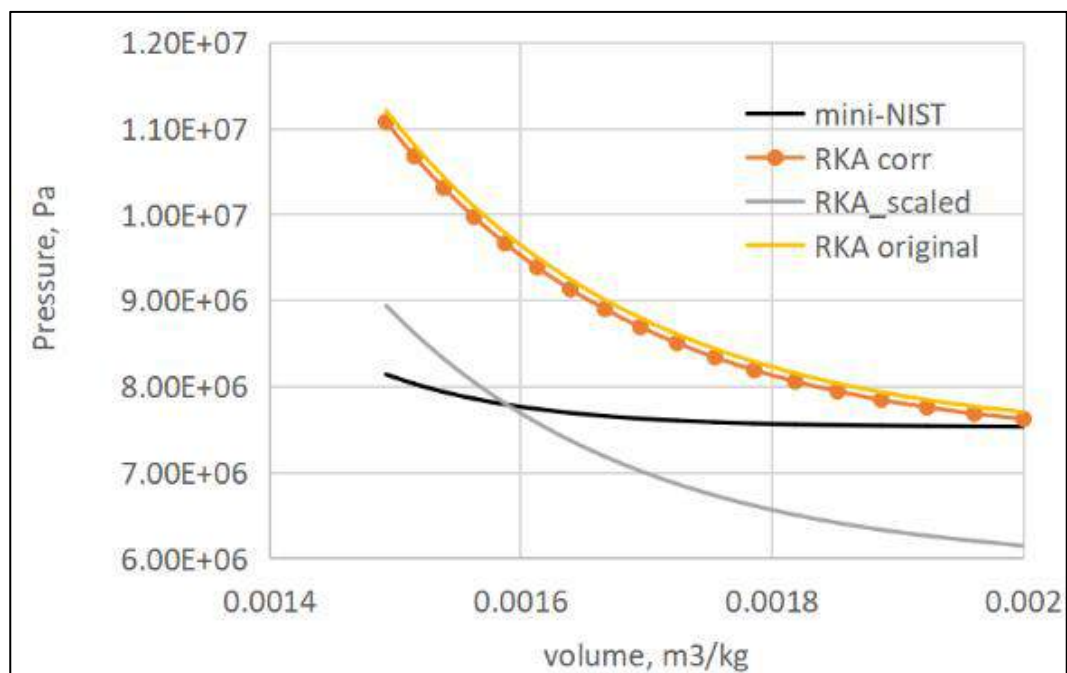


Рис. 4.25. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 305K

Результати для Методу 2 визначення тиску із масштабного рівняння стану поблизу критичної точки CO₂.

Результати для Методу 1 показують значну відносну похибку для критичної температури $T=304,3$ K, особливо області молярного об'єму $0,0017\text{--}0,02$ м³/кг. Тому для Методу 2 ця область порушення перевірялася точніше (рис. 4.26).

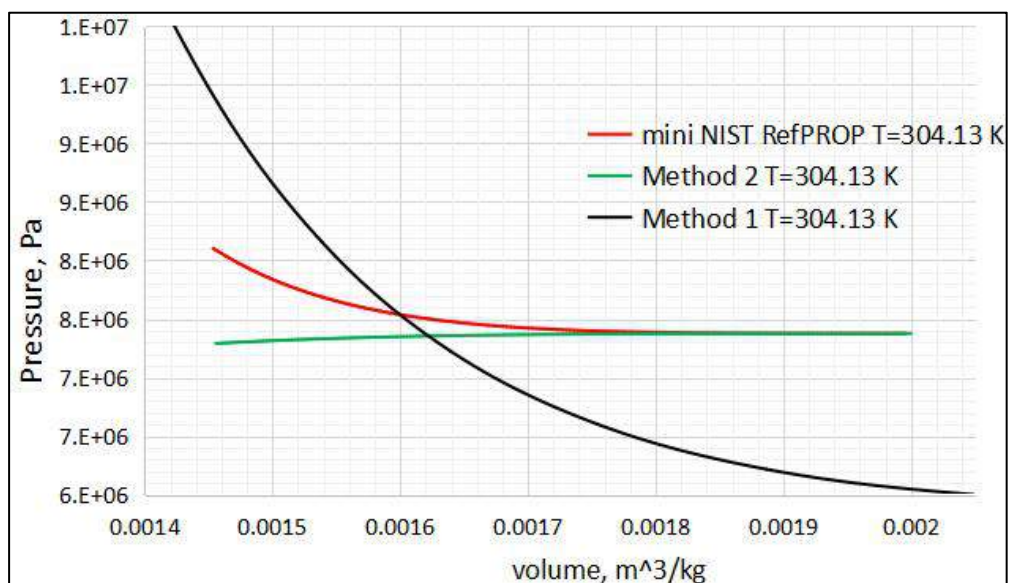


Рис. 4.26. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 304,13 K

Результати для Методу 3 близькі до результатів для Методу 1. Функція перемикавання $f(r)$ не здатна зменшити відносну похибку для тиску у порівнянні з експериментальними даними з mini-NIST RefPROP (рис. 4.27).

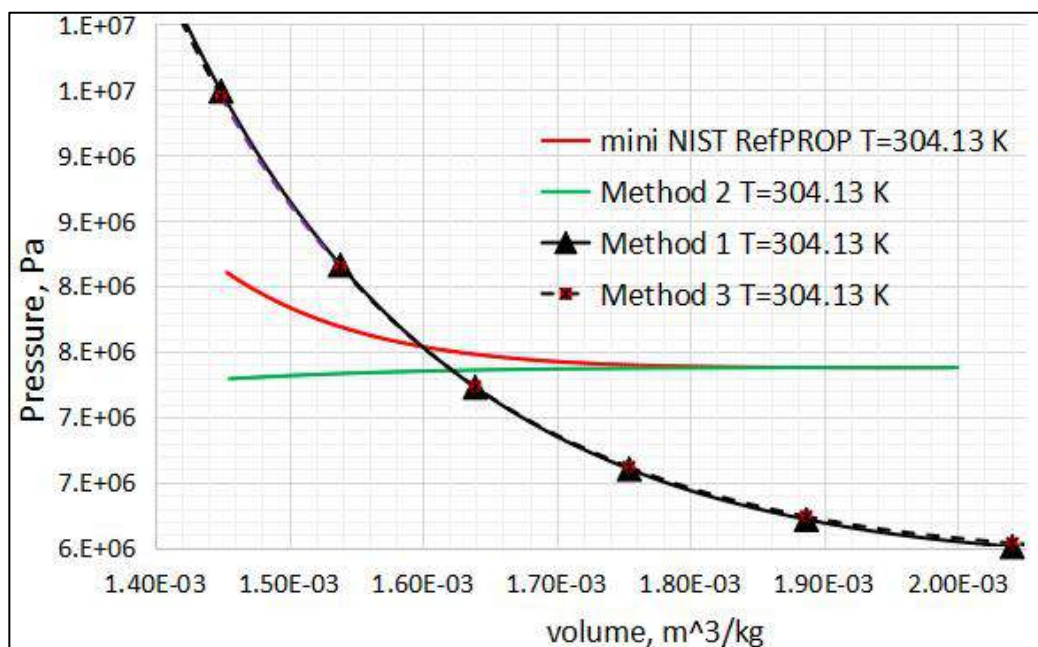


Рис. 4.27. Порівняння результатів між оригінальним, модифікованим рівняннями стану та експериментальними даними. Температура 304,13 К

масштабове рівняння стану з модифікованою моделлю Редліха-Квонга-Анг'є як регулярної частини представлена з більшою точністю за базовими даними в прогнозуванні тиску в критичній області CO₂, ніж оригінальна форма аналітичного кубічного рівняння стану. Рівняння перевірено для широкої області густини та температури в навіколокритичній області від 300 К до 305 К. Регулярна частина масштабного рівняння була модифікована для обох фаз робочого процесу CO₂ - двофазної області та надкритичної. Результати порівнювалися з рівнянням Спана та Вагнера з mini-REFPROP. Порівняльний аналіз між масштабним рівнянням та базовими даними показав відповідність та подібні тенденції ізотерм. Даний метод регулярної модифікації рівняння вимагає двох додаткових параметрів у порівнянні з оригінальною формою рівняння - масштабованих параметрів для тиску двофазної та надкритичної областей. Рівняння для кожного з цих параметрів представлені тут у

зручній формі та описані в діапазоні від 300 до 305 К для ізотерм від мінімальних до максимальних об'ємів для кожної температури. Модифікація в регулярній частині масштабного рівняння зберігає початковий вид моделі Редліха-Квонга-Анг'є, а масштабове рівняння стану дає можливість визначати значення тиску в області критичної точки CO₂ зі значно зниженою похибкою у порівнянні з кубічним аналітичним рівнянням стану.

4.1.5 Лінія плавлення

За будь-якої температури робоче тіло може досягти стану плавлення. Для природного обмеження робочого діапазону речовини використовуємо тиск плавлення. Тиск плавлення залежить від поточної температури, температури потрійної точки та тиску потрійної точки.

Вихідні дані для моделювання лінії плавлення:

- властивості робочого тіла у потрійній точці;
- емпіричні коефіцієнти;
- поточна температура.

$$P_m = 1 + a_1 \frac{T}{T_{tr}} - 1 + a_2 \left(\frac{T}{T_{tr}} - 1 \right)^2 P_{tr}, \quad (4.51)$$

де $a_1 = 1955,539$;

$a_2 = 2055,4593$;

T_{tr} – температура в потрійній точці;

P_{tr} - тиск у потрійній точці;

T – поточне значення температури.

Тиск, отриманий за рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є, порівнюється з тиском плавлення. Якщо тиск, отриманий із рівняння стану, нижче від тиску плавлення, алгоритм робить його рівним тиску плавлення.

Температурні межі застосування рівняння: від температури потрійної точки до 270 К, однак рівняння може бути екстрапольовано й для більш високих температур.

4.2 Адаптація виразів для розрахунку теплофізичних властивостей робочого тіла на основі прийнятої форми рівняння стану

Диференціальні рівняння Максвелла, що зв'язують тиск, температуру, об'єм та ентропію чистої речовини або гомогенної суміші постійного складу, представлені нижче:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S &= -\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P, \\ \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_S &= -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_V, \\ \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P &= -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T, \\ \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V &= \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T.\end{aligned}\tag{4.52}$$

Ці чотири диференціальні рівняння активно використовують для отримання різних термодинамічних співвідношень.

Ентальпія

За допомогою рівняння можна обчислити відхилення ентальпії від значення, що відповідає ідеально-газовому стану. Зручна форма для розрахунку відхилення ентальпії речовини при відомому тиску та температурі від її значення в ідеально-газовому стані при тій же температурі має вигляд

$$H = H^0(T) + PV - RT - \frac{a(T)}{b}(1+n)\ln \frac{V+b}{V},\tag{4.53}$$

$$H^0(T) = C_1 T + \frac{1}{2}C_2 T^2 + \frac{1}{3}C_3 T^3 + \frac{1}{4}C_4 T^4 + \frac{1}{5}C_5 T^5 - H^0(T^0),$$

де $H^0(T)$ – ідеально-газова ентальпія при заданій температурі;

P – тиск, отриманий при вирішенні рівняння стану;

C_1 – C_5 – поліноміальні коефіцієнти;

$H^0(T)^0$ – референсне значення ентальпії.

Оскільки рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є залишилося без змін для газової та надкритичної фаз, то для визначення рівняння ентальпії в цих фазах рівняння залишається без змін.

Параметр зсуву α використовується для досягнення результатів, найбільш близьких до базових даних для розрахунку ентальпії рідини. Для цього ентальпія з оригінального рівняння об'єму, визначена на попередньому етапі модифікації, множиться на α . Shift-параметр тут є кутом, який використовується для повороту модифікованої ізотерми ближче до базової ізотерми. α -розподіл знайдено для діапазону температури від 220 К до 300 К з кроком 20 К (рис. 4.28).

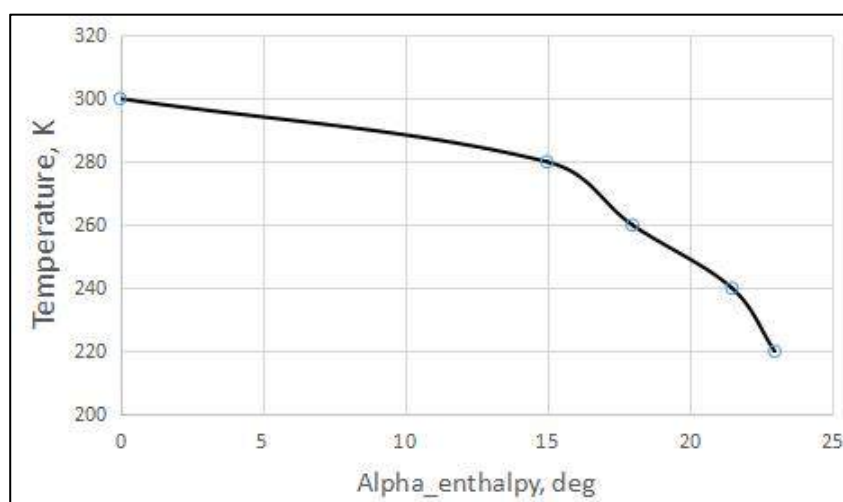


Рис. 4.28. Розподіл параметрів зсуву ентальпії залежно від температури

Параметри зсуву ентальпії можна знайти для будь-якої температури в діапазоні від 216,59 до 300 К.

Рівняння для ентальпії.

$$\alpha = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 + a_6 T^6, \quad (4.54)$$

де $a_0 = -6653.908$; $a_1 = 82.5535$; $a_2 = -0.2864$; $a_3 = -7.7175\text{E-}05$; $a_4 = 1.3095\text{E-}06$; $a_5 = 1.92518\text{E-}09$; $a_6 = -7.59698\text{E-}12$,

а для визначення ентальпії рідини після модифікації рівняння РКА можна використати співвідношення

$$I = I_{\text{mod}} \cos(\alpha) + V \sin(\alpha). \quad (4.55)$$

Вихідне рівняння ентальпії RKA, модифіковане рівняння RKA та базові дані щодо ентальпії представлені на рис. 4.27.

Масштабний коефіцієнт і параметр зсуву здатні наблизити модифіковане рівняння стану RKA до базових даних із задовільною похибкою для всієї області ентальпії рідини - близько 1-2% (рис. 4.29).

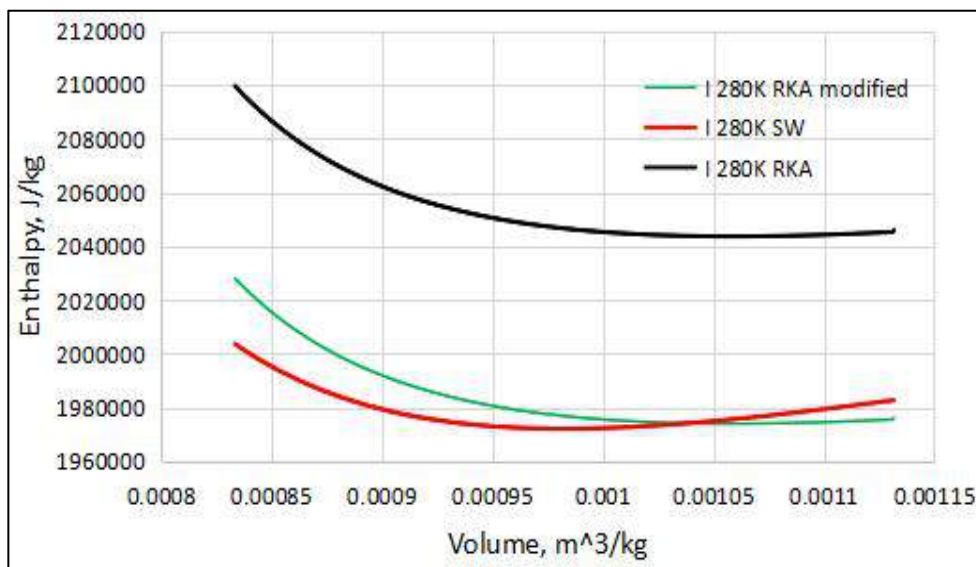


Рис. 4.29. Ентальпія рідини для RKA, для NIST RefPROP і для рівняння стану RKA, модифікованого параметром зсуву. Температура 280 К

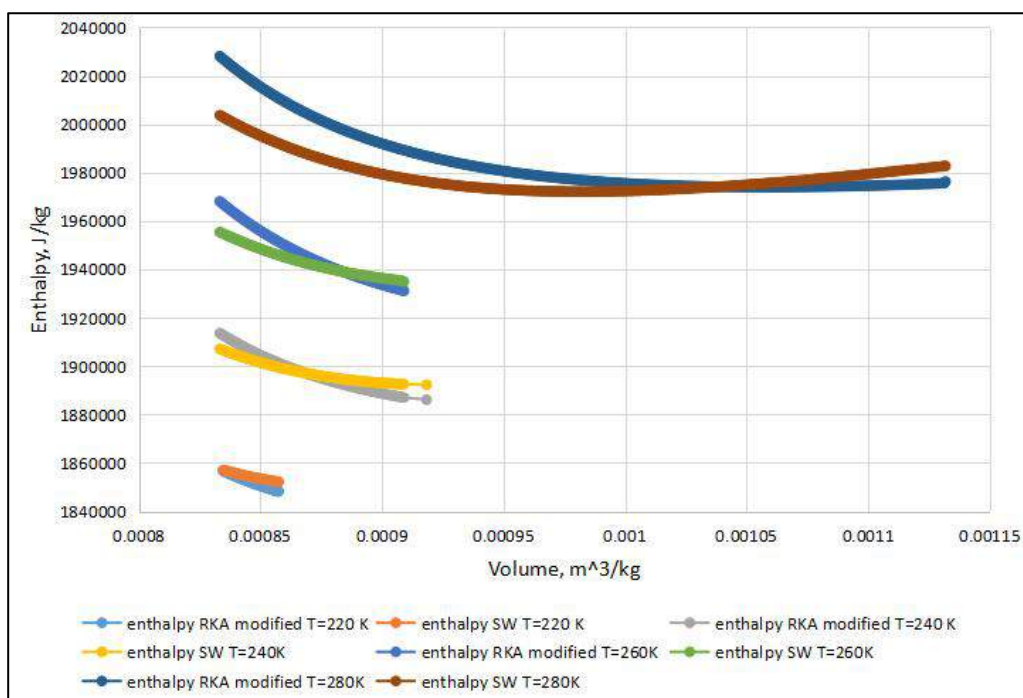


Рис. 4.30. Ентальпія рідини для RKA, для NIST RefPROP і для модифікованого за параметром зсуву рівняння стану RKA. Температура від 220 К до 280 К

Для двофазної області ентальпія знаходиться за допомогою тиску насиченої пари, об'ємів парової та рідкої фази, а також при відомій температурі. Спочатку знайдено ентальпію для парової та рідкої фаз окремо:

$$H_{vap} = H^0(T) + PV_{vap} - RT - \frac{a(T)}{b}(1+n) \ln \frac{V_{vap} + b}{V_{vap}}, \quad (4.56)$$

$$H_{liq} = H^0(T) + PV_{liq} - RT - \frac{a(T)}{b}(1+n) \ln \frac{V_{liq} + b}{V_{liq}}.$$

Використовуючи отриманий раніше рівень сухості, можна знайти сумарну ентальпію для двофазної області.

$$H = \text{quality} H_{vap} + (1 - \text{quality}) H_{liq}. \quad (4.57)$$

Для області критичної точки прийнято використовувати ентальпію, отриману зазначеннями критичного тиску, температури та об'єму.

Ентропія

За допомогою рівняння Редліха-Квонга-Анг'є можна обчислити відхилення значення ентропії від того, що відповідає ідеально-газовому стану. Зручна форма для розрахунку відхилення ентропії речовини при відомому тиску та температурі від її значення в ідеально-газовому стані при тій же температурі має вигляд

$$S = S^0(T, P^0) + R \ln \frac{V - b}{V^0} + \frac{da(T)}{dT} \ln \frac{V + b}{V}, \quad (4.58)$$

$$S^0(T, P^0) = S(T^0, P^0) + C_1 \ln(T) + C_2 T + \frac{1}{2} C_3 T^3 + \frac{1}{4} C_5 T^4,$$

$$\frac{da(T)}{dT} = -n \frac{A(T)}{T},$$

де S - ентропія, отримана з рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є;

$S^0(T, P^0)$ - ідеально-газова ентропія при заданій температурі;

P - тиск, отриманий при вирішенні рівняння стану;

C_1 - C_5 – поліноміальні коефіцієнти;

$S^0(T^0, P^0)$ – референсне значення ентропії.

Якщо рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є залишиться без змін для газової та надкритичної фаз, то рівняння для визначення ентропії в цих фазах також залишається без змін.

Параметр зсуву α використовується для досягнення результатів, найбільших до базових даних ентропії рідини. Для цього ентропія з оригінального рівняння та об'єму, які були визначені на попередньому етапі модифікації, множаться на α . Shift-параметр тут є кутом, який використовується для повороту модифікованої ізотерми ближче до базової ізотерми. α -розподіл знайдено для діапазону температури від 220 К до 280 К з кроком 20 К (рис. 4.31).

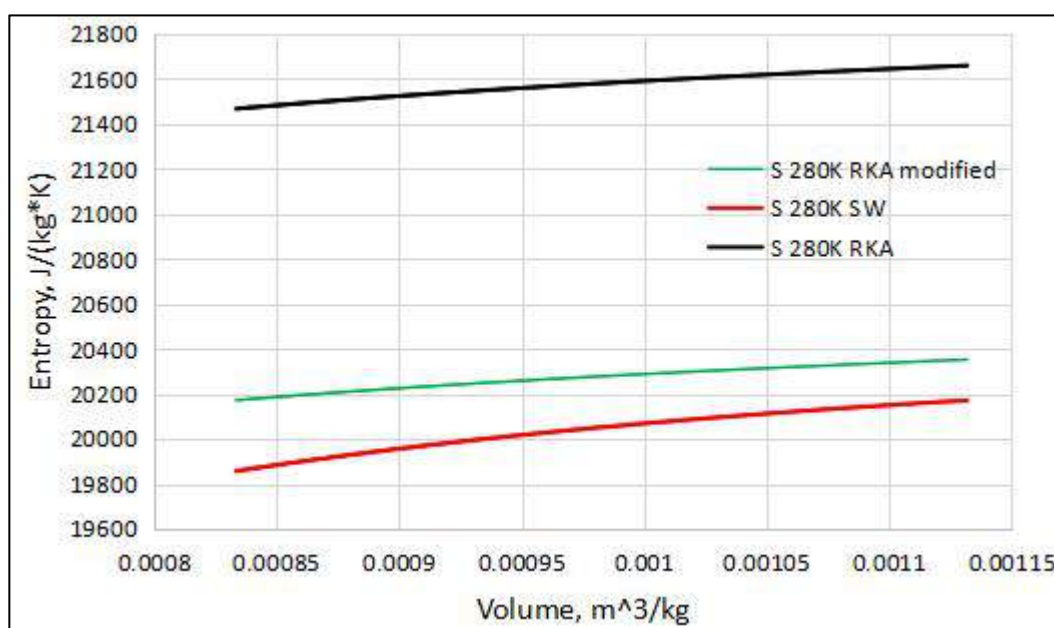


Рис. 4.31. Ентропія для RKA, для NIST RefPROP і для RKA, модифікованого зсув-параметром. Температура 280 К

Параметри зсуву ентропії можна знайти для будь-якої температури в діапазоні від 216.59 до 300 К:

$$\alpha = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 + a_6 T^6, \quad (4.59)$$

де $a_0 = 45.5899$; $a_1 = -0.05667$; $a_2 = -0.0002944$; $a_3 = 8.678409\text{E-}07$; $a_4 = -6.245244\text{E-}10$; $a_5 = -1.945913\text{E-}12$; $a_6 = 3.104539\text{E-}15$,

а ентальпію рідини після модифікації рівняння RKA можна знайти як

$$S = S_{\text{mod}} \cos(\alpha) + V \sin(\alpha), \quad (4.60)$$

Оригінальне рівняння ентропії RKA, модифіковане рівняння RKA та базові дані ентропії представлені на рис. 4.32.

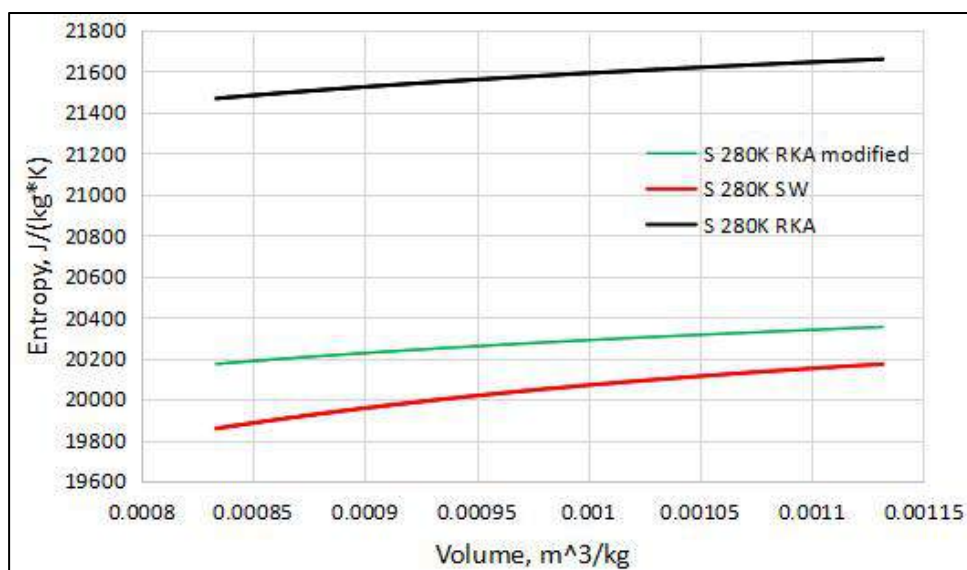


Рис. 4.32. Ентропія рідини для RKA, для NIST RefPROP та для рівняння стану RKA, модифікованого параметром зсуву. Температура 280 К

Параметр зсуву здатен наблизити модифіковане рівняння стану RKA до базових даних із задовільною похибкою для всієї рідкої області - близько 1-1.5% (рис. 4.33).

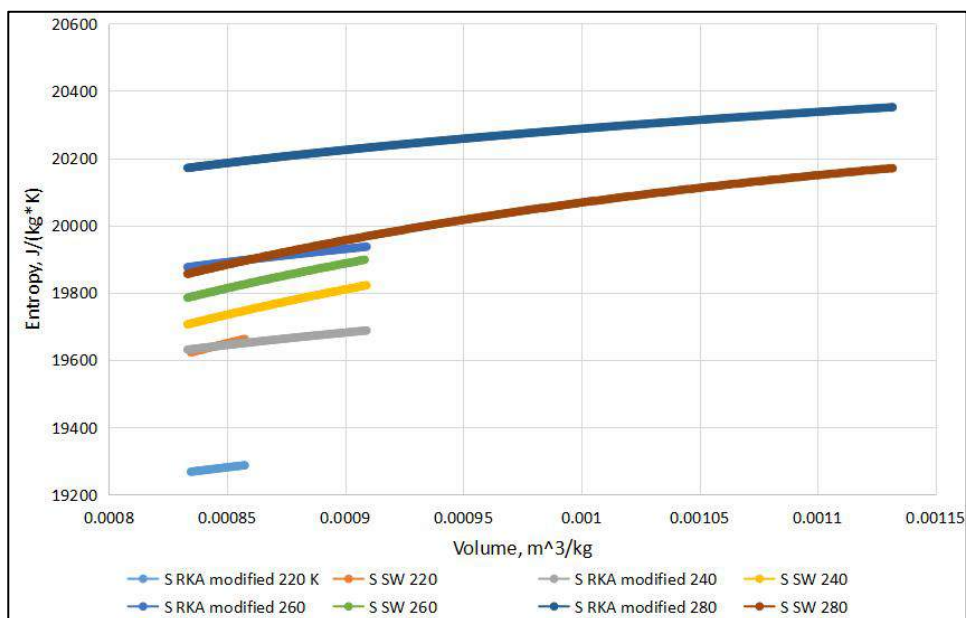


Рис. 4.33. Ентропія рідини для RKA, для NIST RefPROP і для модифікованого за параметром зсуву рівняння стану RKA. Температура від 220 К до 280 К

Для двофазної області ентропія знаходиться за допомогою тиску насиченої пари, об'ємів парової та рідкої фази, а також при відомій температурі. Спочатку знайдено ентропію для парової та рідкої фази окремо.

$$S_{vap} = S^0(T, P^0) + R \ln \frac{V_{vap} - b}{V^0} + \frac{da(T)}{dT} \ln \frac{V_{vap} + b}{V_{vap}}, \quad (4.61)$$

$$S_{liq} = S^0(T, P^0) + R \ln \frac{V_{liq} - b}{V^0} + \frac{da(T)}{dT} \ln \frac{V_{liq} + b}{V_{liq}}.$$

Використовуючи отриманий раніше рівень сухості, можна знайти сумарну ентропію для двофазної області.

$$S = \text{quality} \cdot S_{vap} + (1 - \text{quality}) \cdot S_{liq}. \quad (4.62)$$

Для області критичної точки прийнято використовувати ентропію, отриману за значеннями критичного тиску, температури та об'єму.

Отримані співвідношення між тиском, об'ємом, ентальпією та ентропією задовольняють вимогам правила Максвелла та з їх допомогою можна вивести формули для визначення інших термодинамічних параметрів, необхідних для аналізу тривимірного потоку у відцентровому компресорі.

4.3 Висновки до четвертого розділу

1. Розроблено модифіковане рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, що дозволяє описати всю робочу область CO₂ у надкритичній, газовій, двофазній, рідкій, а також в околиці критичної точки.

2. Сформовано вимоги до граничних умов для використання математичної моделі рівняння стану. Як основні граничні умови використовують температуру й густину. Додатковими граничними умовами є властивості робочого тіла та деякі емпіричні коефіцієнти, які можна взяти з довідкової літератури.

3. Встановлено, що рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є в немодифікованому вигляді дає у межах заданого збіг з експериментальними даними для широкого діапазону температур у надкритичній (Додаток Б) та газовій (Додаток А) областях.

4. Розроблено масштабні поправки до коефіцієнта рівняння $A(T)$ у моделі рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, що дозволило істотно знизити похибку при визначенні тиску в широкому діапазоні температур з немодифікованим рівнянням стану. Для рідкої області розглядалася температурна область від 220 К до 300 К (похибки для тиску збільшуються зі збільшенням густини, див. Додаток В). Для знаходження тиску насиченої пари використовувався метод Лі-Кеслера. Порівняння експериментальних і розрахункових значень тиску показало їх у межах заданого збіг (відхилення менше 5 %, Додаток Д). Для двофазної області розглядався температурний діапазон від 216,6 К до 304,12 К. Отриманий за методом Лі-Кеслера тиск насиченої пари використовувався при розв'язанні кубічного рівняння Редліха-Квонга-Анг'є для визначення об'єму газової фази. Об'єм рідкої фази знаходився за емпіричним методом Ямади-Ганна. Порівняння об'ємів газової та рідкої фази дало задовільний збіг з експериментальними даними для температури 296 К і 303 К (похибка менше 3 %).

5. Запропонована в роботі математична модель для визначення ступеня сухості в області двофазного стану CO_2 , що використовує за основу модифіковане рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є та метод Ямади-Ганна, дозволяє отримати значення об'ємів газової та рідкої фази з хорошою точністю порівняно з базовими значеннями. Отримані результати для ступеня сухості показали у межах заданого збіг (похибка менше 5% для основного діапазону температури і густини) з базовими значеннями, що забезпечує придатність запропонованої математичної моделі в усій області двофазного стану, обмеженій температурним діапазоном від 220 до 300 К.

6. Запропоновані масштабні коефіцієнти для переходу через лінію насичення без великої похибки для солвера. Рівняння використовуються також на 20 К від лінії насичення у рідкій області та на 5 К від лінії насичення у газовій області.

7. Завдяки простій формі рівняння стану та невеликій кількості емпіричних коефіцієнтів отриману математичну модель можна використовувати для розв'язання

практичних завдань обчислювальної гідродинаміки без великих витрат на обчислення.

8. Отримано найбільш сприятливу для зниження похибки визначення тиску математичну модель в області критичної точки. Результати для математичної моделі Методу 1 показують значну відносну похибку для критичної температури $T=304,13$ К, особливо області молярного об'єму $0.0017\text{--}0.02$ м³/кг. Тому для Методу 2 ця область перевірялася точніше. Математична модель Методу 2 використовується для подальшого впровадження в програму для одновимірних розрахунків потоку, а також для моделювання в тривимірному просторі 3D AxCFD™.

Результати, отримані в четвертому розділі, опубліковано в роботах [18]-[26].

4.4 Література до четвертого розділу

- [1] Рид, Р., Праусниц, Д., & Шервуд, Т. (1982). Свойства газов и жидкостей. 3 изд. Л.: Химия.
- [2] Lee, B. I. & Kesler, M. G. (1975). A Generalized Thermodynamic Correlation Based On Three-Parameter Corresponding States. *AIChE Journal*, vol. 21, iss. 3, pp. 510–527. <https://doi.org/10.1002/aic.690210313>.
- [3] Span, R. & Wagner, W. (1996). A New Equation Of State For Carbon Dioxide Covering The Fluid Region From The Triple-Point Temperature To 1100 K At Pressures Up To 800 Mpa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 25, iss. 6, pp. 1509–1596. <https://doi.org/10.1063/1.555991>.
- [4] Anwar, S. & Carroll, J. J. (2016). Carbon Dioxide Thermodynamic Properties Handbook: Covering Temperatures From -20 °C To 250 °C And Pressures Up To 1000 Bar. John Wiley & Sons, 608 p. <https://doi.org/10.1002/9781119083948>.
- [5] Yamada, T. & Gunn, R. D. (1973). Saturated Liquid Molar Volumes. Rackett Equation. *Journal of Chemical and Engineering Data*, vol. 18, iss. 2, pp. 234–236. <https://doi.org/10.1021/jc60057a006>.
- [6] Schofield, P. (1969). Parametric representation of the equation of state near a critical point. *Physical Review Letters* 22, no. 12: 606.

- [7] Chapela, Gustavo A., and John S. Rowlinson. Accurate Representation Of Thermodynamic Properties Near The Critical Point. (1974). Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1: Physical Chemistry in Condensed Phases 70: 584-593.
- [8] Orbey, Hasan, and Stanley I. Sandler. (1998). Modeling Vapor-Liquid Equilibria: Cubic Equations Of State And Their Mixing Rules. Cambridge University Press.
- [9] Lee, Sukbae, Joonhyeon Jeon, Wonsoo Kim, and Tong-Seek Chair. (2008). A New Model Approach For The Near-Critical Point Region: 1. Construction Of The Generalized Van Der Waals Equation Of State. The Journal of Physical Chemistry B 112, no. 49: 15725-15741.
- [10] Span, Roland, and Wolfgang Wagner. (1996). A New Equation Of State For Carbon Dioxide Covering The Fluid Region From The Triple - Point Temperature To 1100 K At Pressures Up To 800 Mpa. Journal of physical and chemical reference data 25, no. 6: 1509-1596.0.
- [11] Безверхий, П. П., В. Г. Мартынец, Э. В. Матизен. (2009). Уравнение состояния ^4He , включающее регулярную и скейлинговскую части. Физика низких температур.
- [12] Bezverkhii, P. P., V. G. Martynets, and E. V. Matizen. (2007). A Scaling Equation Of State Near The Critical Point And The Stability Boundary Of A Liquid. Journal of Engineering Thermophysics 16, no. 3: 164-168.
- [13] Vinhal, Andre PCM, Wei Yan, and Georgios M. Kontogeorgis. (2019). Modeling The Critical And Phase Equilibrium Properties Of Pure Fluids And Mixtures With The Crossover Cubic-Plus-Association Equation Of State. Journal of Chemical & Engineering Data 65, no. 3: 1095-1107.
- [14] Adenekan, Kolawole, and Brenda Hutton-Prager. (2020). Modeling The Solubility Of Alkyl Ketene Dimer In Supercritical Carbon Dioxide: Peng-Robinson, Group Contribution Methods, And Effect Of Critical Density On Solubility Predictions. Fluid Phase Equilibria 507: 112415.
- [15] Aungier, Ronald H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation Of State For Fluid Dynamic Analysis Applications. 277-281. <https://doi.org/10.1115/1.2817141>

- [16] Vorobieva, H. S. (2021). Modification of the redlich-kwong-aungier equation of state to determine the degree of dryness in the CO₂ two-phase region. *Journal of Mechanical Engineering*, 24(4), 17–27. <https://doi.org/10.15407/pmach2021.04.017>
- [17] Span, Roland, and Wolfgang Wagner. (1996). A New Equation Of State For Carbon Dioxide Covering The Fluid Region From The Triple - Point Temperature To 1100 K At Pressures Up To 800 Mpa. *Journal of physical and chemical reference data* 25, no. 6: 1509-1596. <https://doi.org/10.1063/1.555991>
- [18] Vorobieva, H. S. (2022). Modification of the Redlich-Kwong-Aungier Equation of State to Determine the Main Thermodynamic Parameters in the Pure Liquid CO₂ Region. *Journal of mechanical engineering*, 25 (2), 6-13. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.02.006>
- [19] Vorobiova, H. (2022). Modification Of Scaled Equation Of State To Determine The Pressure In The CO₂ Critical Region. *Technology audit and production reserves*, 3(1/65), 12-19. doi:10.15587/2706-5448.2022.261858.
- [20] Vorobiova H. (2023). Comparison Of Different Crossover Equations Of State For Determining The Pressure In The CO₂ Critical Region. *Moderní aspekty vědy: Xxvii. Díl mezinárodní kolektivní monografie / mezinárodní ekonomický institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní ekonomický institut s.r.o. UDC 001.32: 1/3] (477) (02)C91*
- [21] Vorobiova, H. (2022). Application Of The Scaling Theory To Determine The Pressure In The Near-Critical CO₂ Region. *Modern aspects of science modernization: Status, problems, development trends*, 337.
- [22] Vorobiova H. (2023). Crossover Equations of State to Determine the Pressure in the CO₂ Near-Critical Region «International Symposium on Advanced Materials and Application» ISSN : 1662-9752
- [23] Воробйова Г.С. (2021). Модифікація рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для застосування у широкому діапазоні роботи CO₂. Сучасні проблеми машинобудування, секція “Механіка”.9, Тези доповідей конференції молодих вчених та спеціалістів. Друкується за рішенням Вченої ради Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України, протокол № 5 від 16.06.2021 р.

- [24] Vorobiova H., Fesenko K., Dehtiarov O. (2024). Implementation Of A Modified Redlich-Kwong-Aungier Equation Of State For The Centrifugal Compressor Simulation In The Two-Phase CO₂ Region. Information technologies: science, engineering, technology, education, health: MicroCAD–2024, P. 13.
<https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>
- [25] Воробйова Г.С., Фесенко К. В., Дегтярьов О. Д. (2024). Моделювання одновимірних і тривимірних потоків рідкого вуглекислого газу в промисловому відцентровому компресорі. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доп. 32-ї міжнар. наук.-практ. конф. MicroCAD–2024, [22-25 травня 2024 р.] / ред. Є. І. Сокол. – Харків: НТУ "ХПІ", 2024. – Р. 24.
<https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/79693>

РОЗДІЛ 5. ВАЛІДАЦІЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ НА S-CO₂ КОМПРЕСОРНОМУ ЦИКЛІ

Математична модель була порівняна з експериментальними ізотермами для температурного діапазону від мінімальної температури до надкритичних умов роботи відцентрового компресора. У якості граничних умов прийняті умови із серії експериментів С - рідкий CO₂ на вході до компресора (296 K).

Для порівняння була розроблена програма для розрахунку тиску в одновірному просторі при заданій температурі та густини, що змінюється в діапазоні від 10 до 1200 кг/м³. Завдяки умовам, які розділяють робочий діапазон CO₂, солвер вибирає правильні рівняння для конкретної фази робочого тіла. Рівняння, які використовувалися у програмі, наведено в розділі 4.

Перевірка математичної моделі для рідкого CO₂ на вході до компресора (296 K)

Математичну модель, яка описує робочий діапазон CO₂, перевірено в найбільш складних умовах роботи компресора циклу S-CO₂. Для дослідження процесу в циклі було проведено три серії експериментів (рис. 5.1):

1. Перша серія експериментів досліджувала стискання рідкого CO₂.
2. Друга серія експериментів присвячена використанню компресора в широкій області: умови на вході до компресора змінювалися від чистого газу до чистої рідини.
3. Для третьої серії експериментів внесені конструкційні зміни - додано нагрівач для створення двофазної області у відцентровому компресорі.

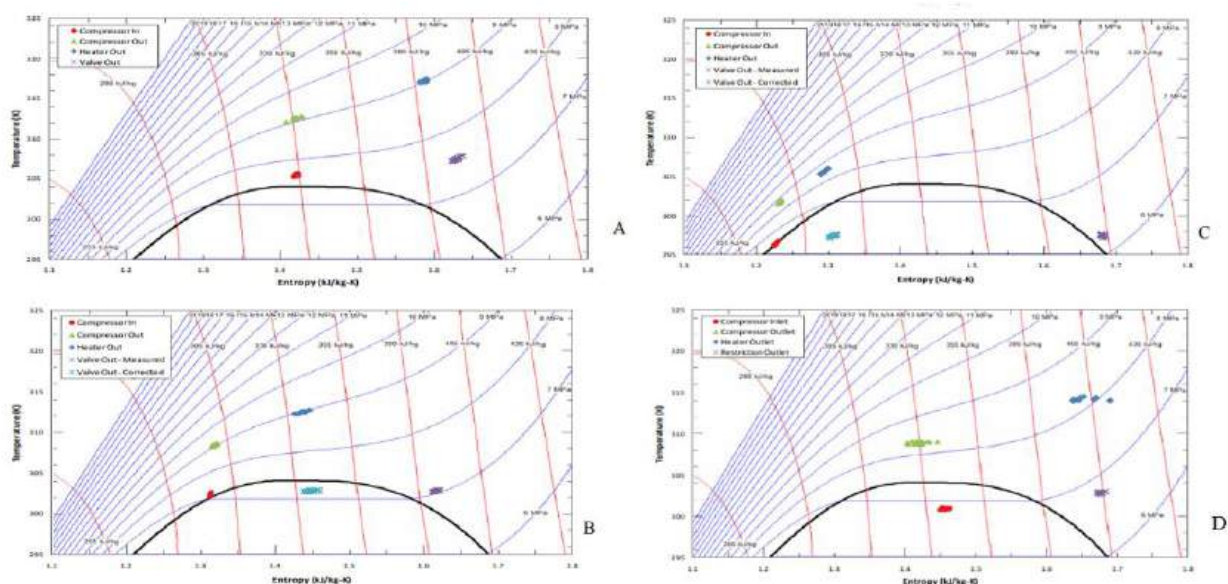


Рис. 5.1. T-S діаграма S-CO₂ компресорного циклу для: А - надкритичного CO₂ на вході, В - для рідкого CO₂ на вході (303K), С - для рідкого CO₂ на вході (296K), D - для двофазного CO₂ на вході (296K)

Програму розроблено в інтегрованому середовищі Visual Studio у вигляді консольного додатку, написаного на мові C++. Visual Studio - це комплексне інтегроване середовище розробки (IDE), яке можна використовувати для запису, редагування, налагодження та складання коду, а потім розгортання програми. Умови, які використовуються в програмі, розбивають робочий простір на декілька фаз:

- надкритична фаза: $T > 305.0$ (температура більше критичної температури 304,12 K);

- рідка фаза: $T < T_{cr}$, $Ro > Ro_{Liq}$, $T > T_{triple}$;

$$Ro_{Liq} = (0.466 + 0.466 (1.9073793 (1 - T_r)^{0.347} - 0.38225 (1 - T_r)^{0.6667} + 0.42897885 (1 - T_r))) \quad (5.1)$$

$$Ro_{vap} = (0.466 + 0.466 (-1.7988929 (1 - T_r)^{0.347} - 0.71728276 (1 - T_r)^{0.6667} + 1.7739244 (1 - T_r))) \quad (5.2)$$

- газова фаза: $T < T_{cr}$, $Ro < Ro_{Vap}$, $Ro < Ro_{cr}$;

- регіон критичної точки: $300.0 < T$, $T < 305.0$, $Ro > 455$, $Ro < 475$;

- двофазна область: $T < T_{cr}$, $T > T_{triple}$, $R_o > R_{oVar}$, $R_o < R_{oLiq}$;
- лінія насичення двофазна область - рідка фаза: $T < T_{cr}$, $R_o > R_{oLiq}$, $R_o < R_{oLiq} + 20$, $T > T_{triple}$;
- лінія насичення двофазна область-газова фаза: $T < T_{cr}$, $R_o < R_{oVar} - 5$, $R_o < R_{ocr}$.

Результати для рідкої фази при температурі 296 К наведено на рис. 5.2. Похибка значень тиску, яка отримана за допомогою програми одномірного простору, наведено на рис. 5.3.

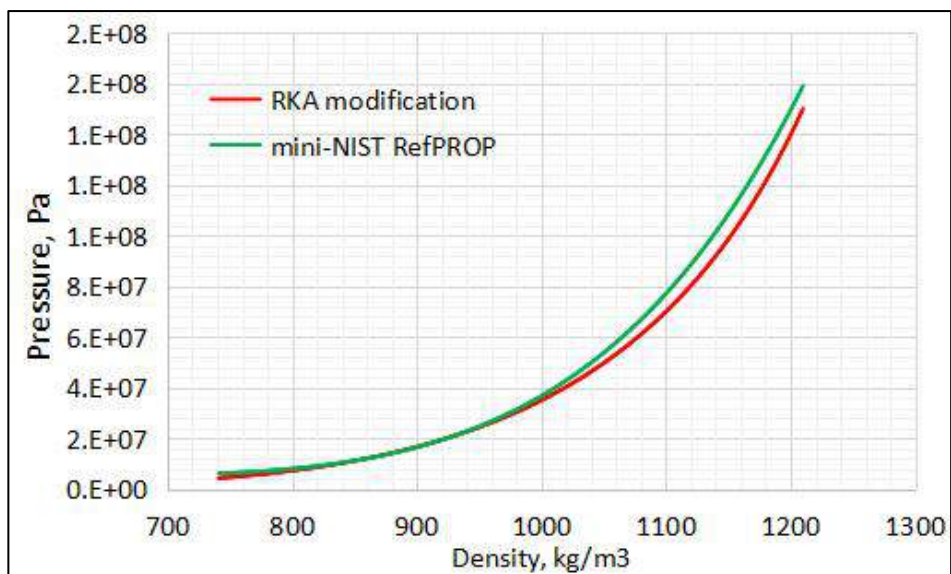


Рис. 5.2. Порівняння значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

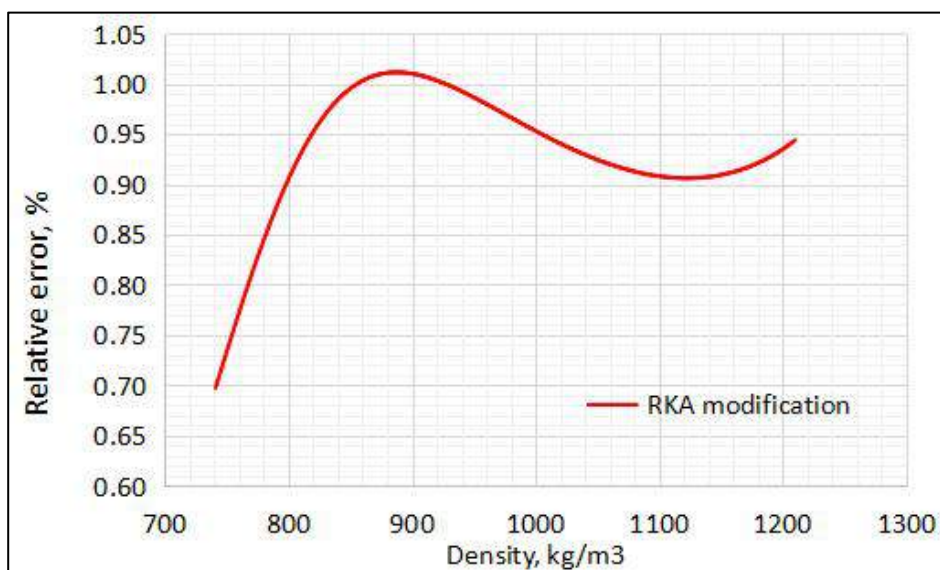


Рис. 5.3. Похибка значень тиску, яка отримана за допомогою програми одномірного простору

Результати для ступеня сухості у двофазній області при температурі 296 К наведені на рис. 5.4. Похибка для значень тиску насиченої пари, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.5. Похибка для значень ступеня сухості, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.6.

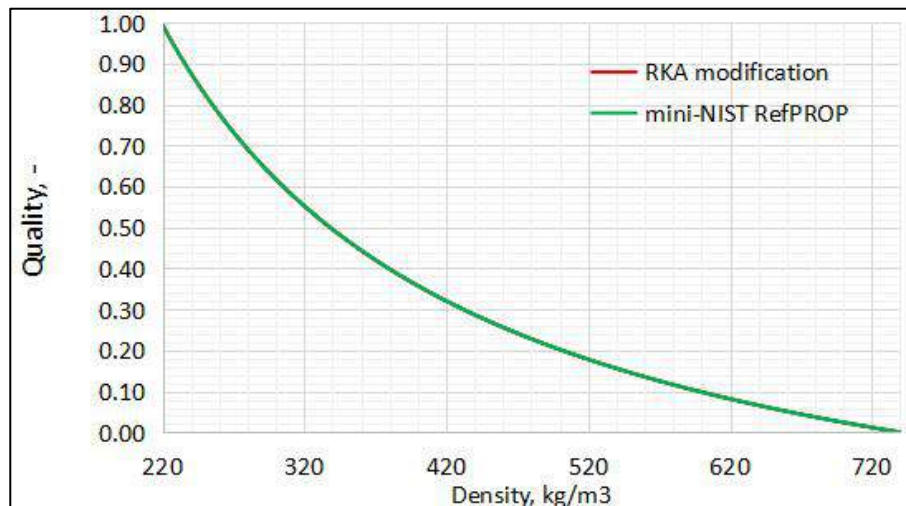


Рис. 5.4. Порівняння значень ступеня сухості, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

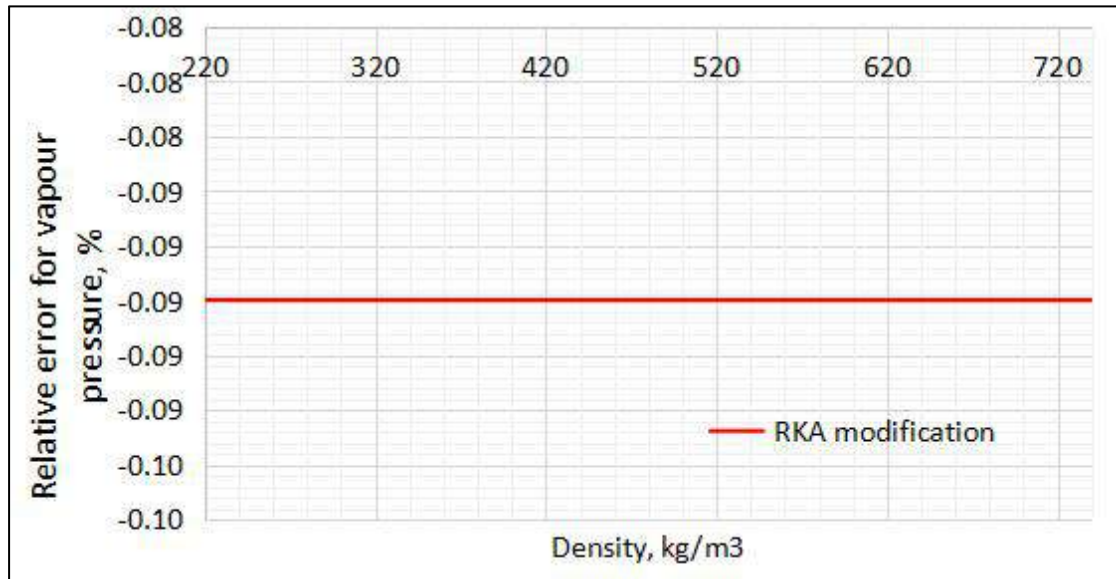


Рис. 5.5. Похибка для значень тиску насиченої пари, отриманих за допомогою програми одномірного простору

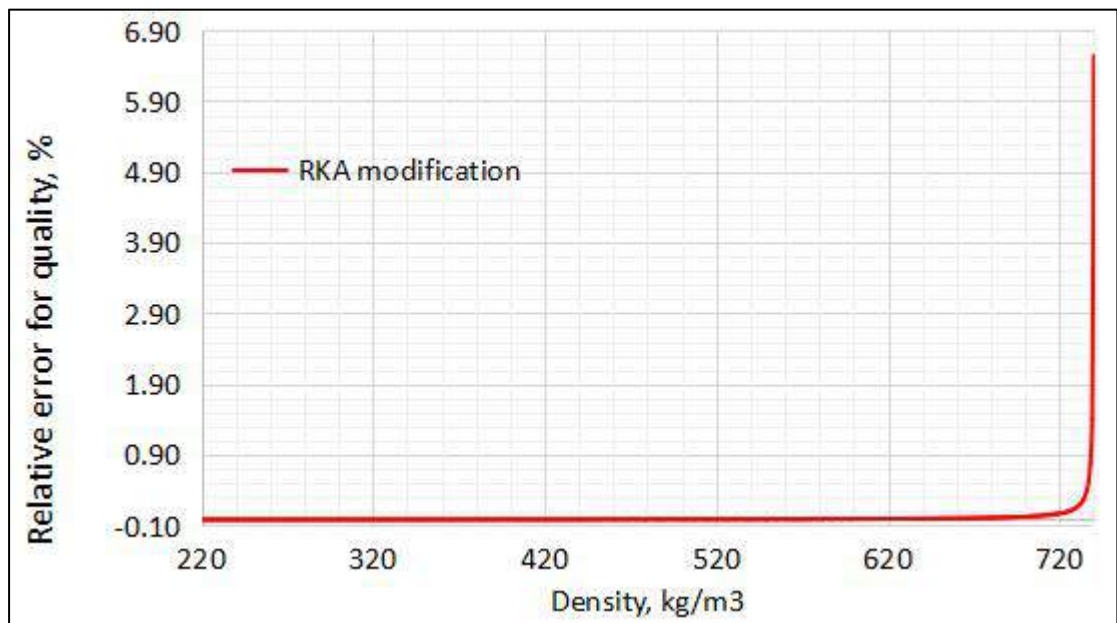


Рис. 5.6. Похибка для значень ступеня сухості, отриманих за допомогою програми одномірного простору

Результати для тиску у газовій області при температурі 296 К наведені на рис. 5.7. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.8.

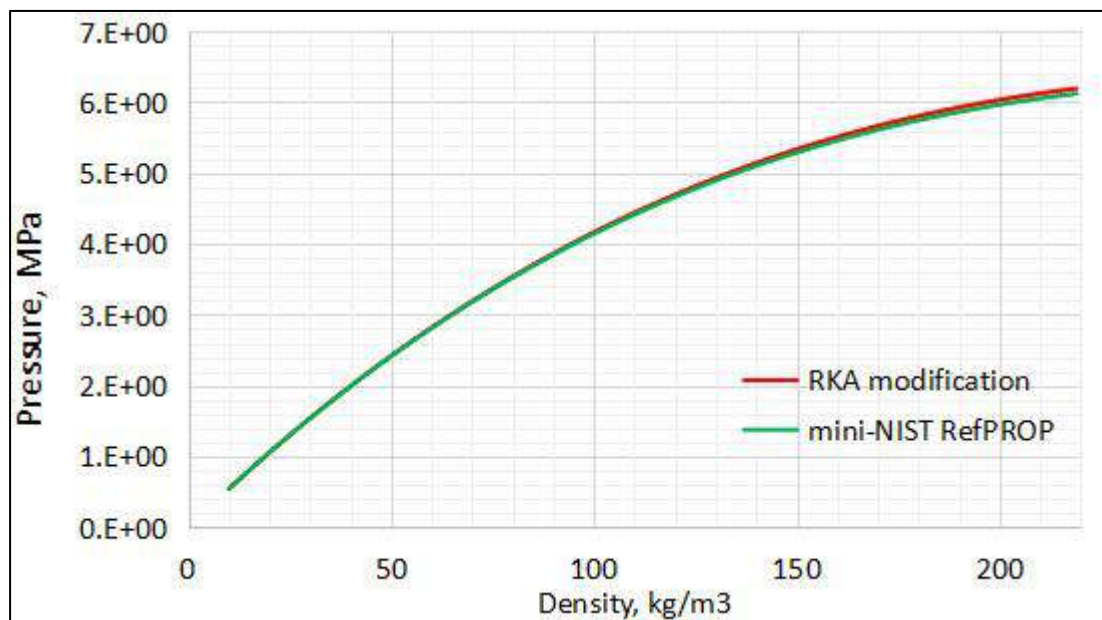


Рис. 5.7. Порівняння значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

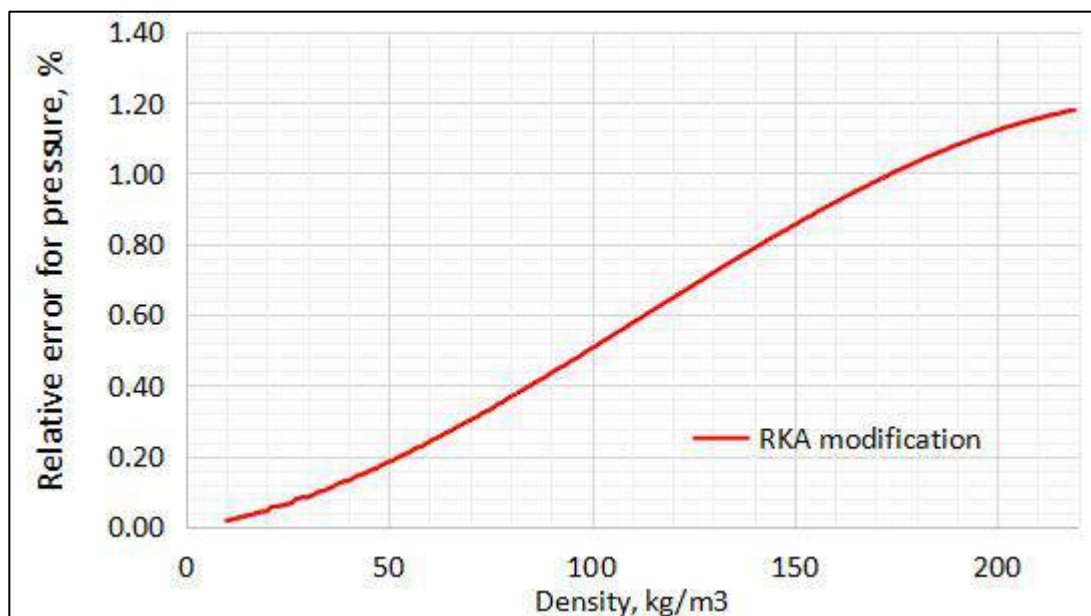


Рис. 5.8. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми
одномірного простору

Результати визначення тиску в області переходу від двофазного до рідкого стану при температурі 296 К наведено на рис. 5.9. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.10.

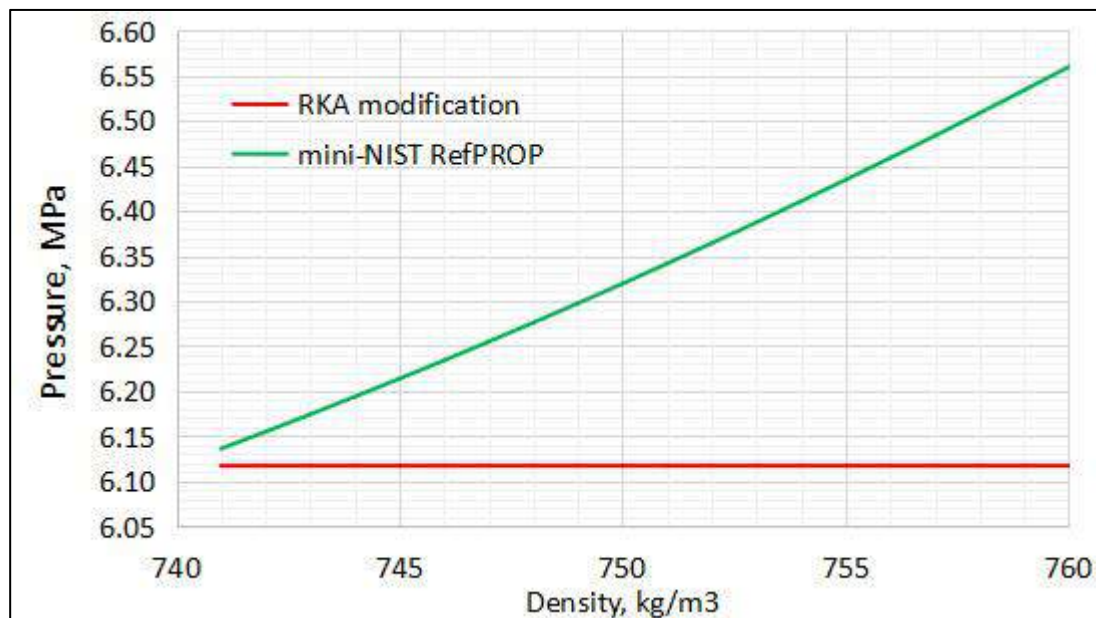


Рис. 5.9. Порівняння значень тиску, отриманих за допомогою програми
одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

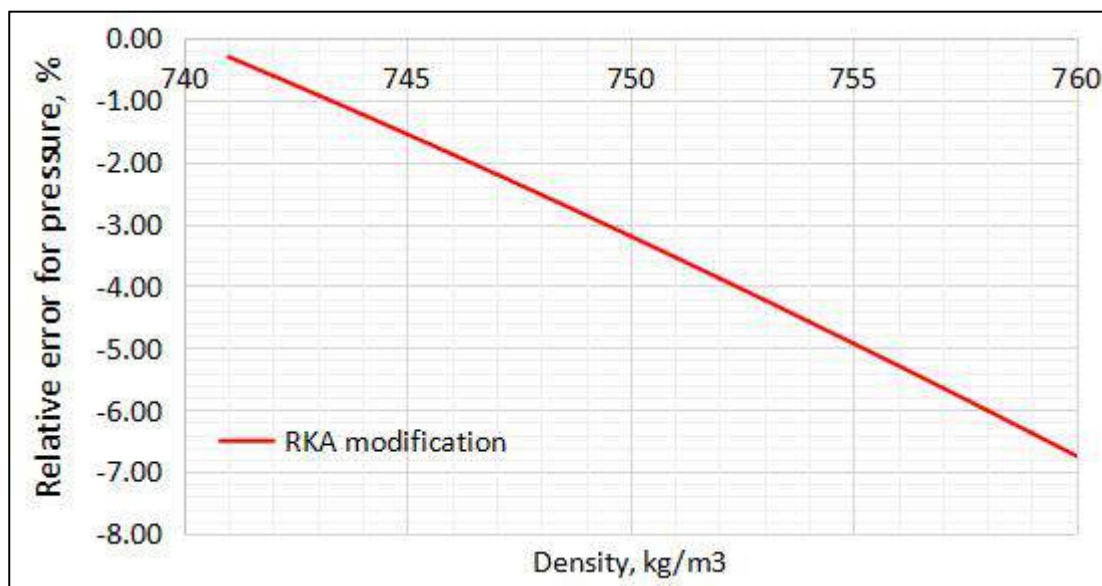


Рис. 5.10. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми
одномірного простору

Як видно з рис. 5.2 – рис. 5.10, результати, отримані у програмі, дали у межах заданого збіг для парового стану робочого тіла, вірно визначила тиск насиченої пари та дала задовільний збіг для рідкого стану робочого тіла (особливо в порівнянні з немодифікованим рівнянням стану).

Перевірка математичної моделі для рідкого CO₂ на вході до компресора (303 K)

Математична модель була провалідована з експериментальними ізотермами для температурного діапазону від мінімальної температури до надкритичних умов роботи відцентрового компресора. У якості граничних умов прийняті умови з серії експериментів В - рідкий CO₂ на вході у компресор (303 K).

Результати для значень тиску рідкої фази при температурі 303 K наведено на рис. 5.11. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.12.

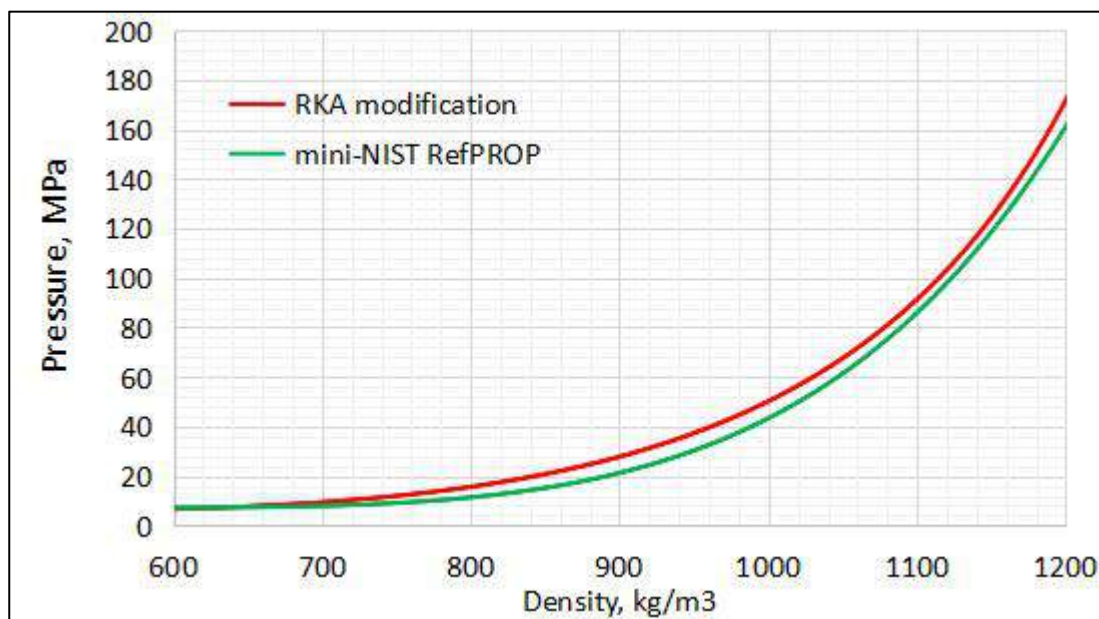


Рис. 5.11. Порівняння значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

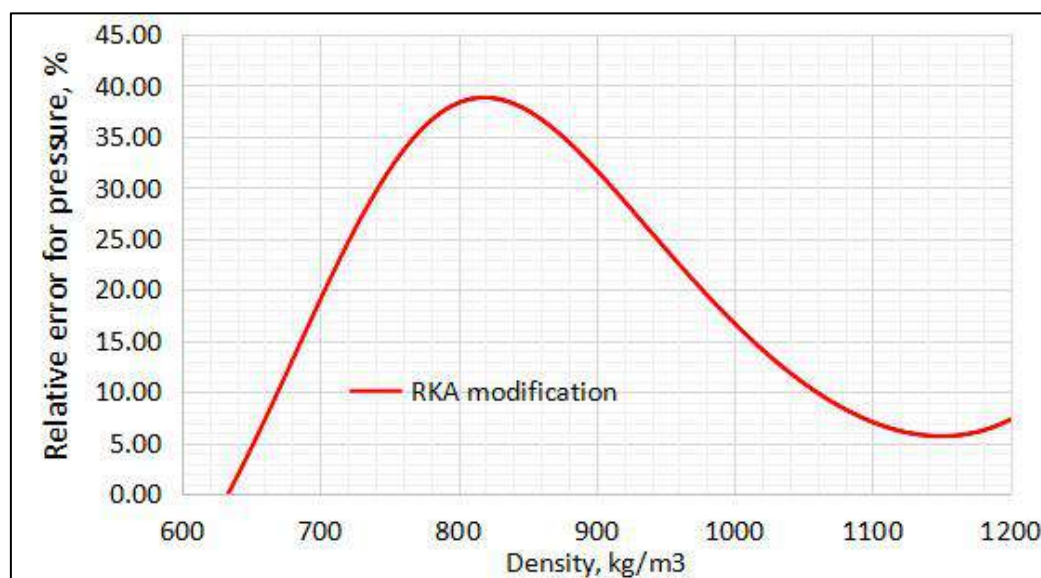


Рис. 5.12. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору

Результати для ступеня сухості в двофазної області при температурі 303 К наведено на рис. 5.13.

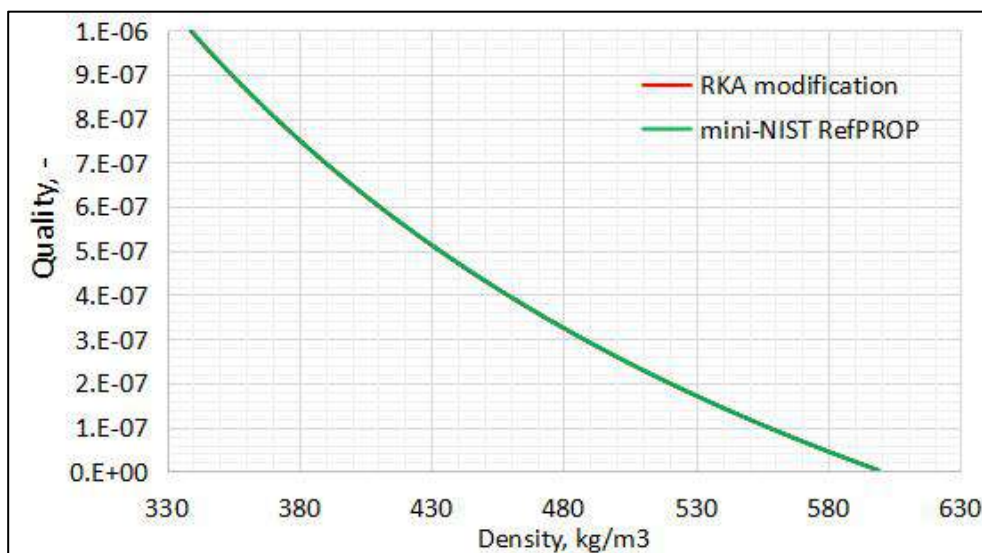


Рис. 5.13. Порівняння значень ступеня сухості, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

Результати для значень тиску у паровому стані робочого тіла при температурі 300 К наведено на рис. 5.14. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору, наведена на рис. 5.15.

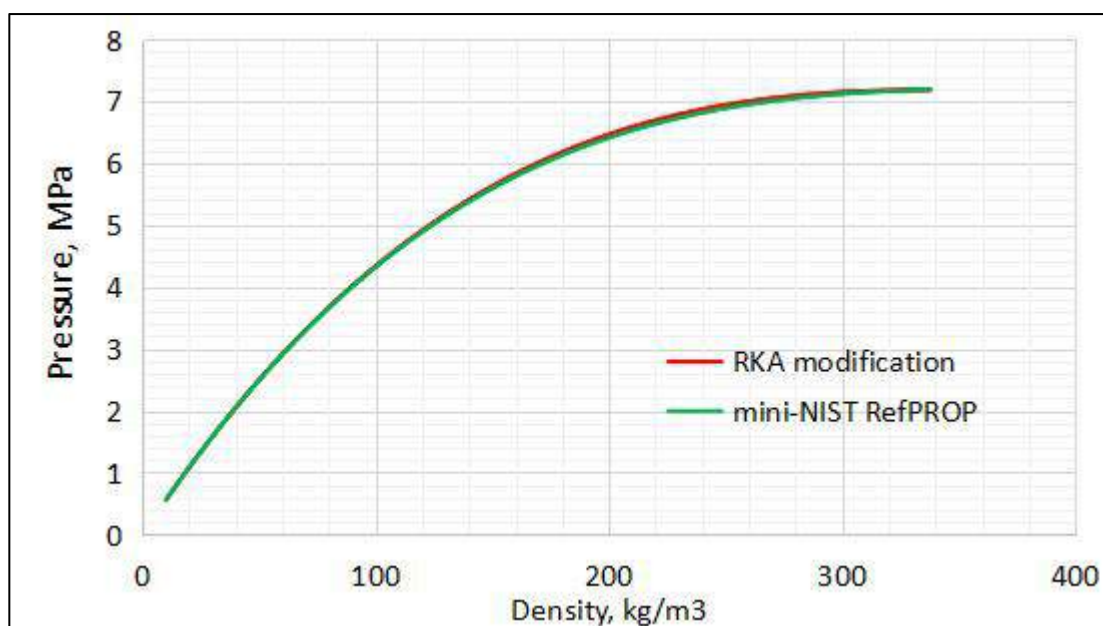


Рис. 5.14. Порівняння значень тиску, отриманих за допомогою програми одномірного простору та програми mini-NIST RefPROP

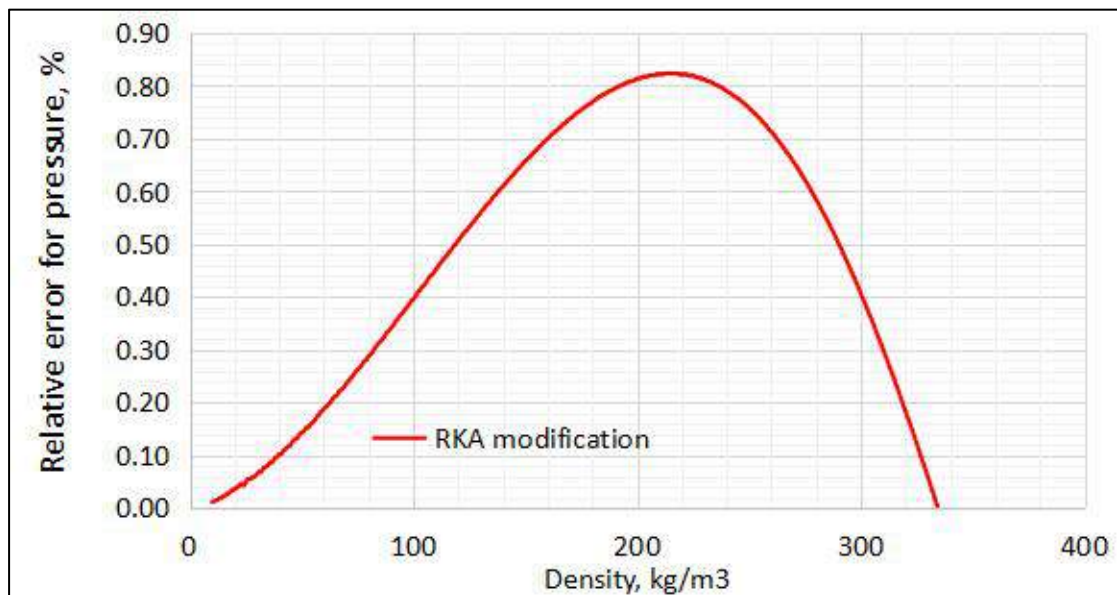


Рис. 5.15. Похибка для значень тиску, отриманих за допомогою програми
одномірного простору

5.1 Висновки до п'ятого розділу

1. Розроблено програму для одномірного розрахунку термодинамічних параметрів реального газу в інтегрованому середовищі Visual Studio у вигляді консольного додатку, написаного на мові C++.

2. За результатами чисельного аналізу показано, що рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є дає у межах заданого результат (менше від 1%) у порівнянні з експериментальною ізотермою в газовій області.

3. Визначено, що в області двофазного стану значення тиску насиченої пари, які отримані за методикою Лі-Кеслера, має у межах заданого збіг з експериментом (менше 1%) та 1-6% для ступеня сухості, різко зростаючи при наближенні до лінії насичення поблизу чистої рідини.

4. Виявлено, що масштабна поправка у формулі коефіцієнта $A(T)$ має сприятливий вплив на похибку. Похибка для тиску чистої рідини знизилася з 70% - 90% до 1% - 6% у більшій частині області для 296 К та з 70% до 46% для 303 К. Особливу увагу варто звернути на близькість температури (296 К і 303 К) до критичної точки (304,13 К).

Результати, які наведені у п'ятому розділі, опубліковано в роботах [4] - [10].

5.2 Література до п'ятого розділу

- [1] Анисимов М. А., Рабинович В. А., Сычев В. В. (1990). Термодинамика критического состояния индивидуальных веществ. Энергоатомиздат.
- [2] Паташинский А. З., Покровский В. Л. (1982). Флуктуационная теория фазовых переходов. «Наука».
- [3] Vorobiova, Hanna. (2022). Modification Of Scaled Equation Of State To Determine The Pressure In The CO₂ Critical Region. Technology audit and production reserves 3, no. 1/65: 12-19.
- [4] Vorobieva, Hanna. (2021). Modification of the Redlich-Kwong-Aungier Equation of State to Determine the Degree of Dryness in the CO₂ Two-phase Region. Journal of Mechanical Engineering. 24. 17-27. <https://doi.org/10.15407/pmach2021.04.017>.
- [5] Vorobieva, H. S. (2022). Modification of the Redlich-Kwong-Aungier Equation of State to Determine the Main Thermodynamic Parameters in the Pure Liquid CO₂ Region. Journal of mechanical engineering, 25 (2), 6-13. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.02.006>
- [6] Vorobiova, H. (2022). Modification Of Scaled Equation Of State To Determine The Pressure In The CO₂ Critical Region. Technology audit and production reserves, 3(1/65), 12-19. <https://doi.org/10.15587/2706-5448.2022.261858>.
- [7] Vorobiova H. (2023). Comparison Of Different Crossover Equations Of State For Determining The Pressure In The CO₂ Critical Region. Moderní aspekty vědy: Xxvii. Díl mezinárodní kolektivní monografie / mezinárodní ekonomický institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní ekonomický institut s.r.o. UDC 001.32: 1/3] (477) (02)C91
- [8] Vorobiova, H. (2021). Application Of The Scaling Theory To Determine The Pressure In The Near-Critical CO₂ Region. Modern aspects of science modernization: Status, problems, development trends, 337.
- [9] Vorobiova H. (2023). Crossover Equations of State to Determine the Pressure in the CO₂ Near-Critical Region. International Symposium on Advanced Materials and Application. ISSN : 1662-9752

[10] Воробйова Г.С. (2021). Модифікація рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для застосування у широкому діапазоні роботи CO₂. Сучасні проблеми машинобудування - 2021, секція "Механіка".9, Тези доповідей конференції молодих вчених та спеціалістів. Друкується за рішенням Вченої ради Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України, протокол № 5 від 16.06.2021 р.

РОЗДІЛ 6 МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК СТУПЕНЯ ВІДЦЕНТРОВОГО КОМПРЕСОРА З ВИКОРИСТАННЯМ МОДИФІКОВАНОГО РІВНЯННЯ СТАНУ

6.1 Математичне моделювання рідкої області CO₂

Відцентровий компресор, відтворений у 1D AxSTREAM®, був імпортований в 3D AxCFD™ для подальшого його розрахунку. Граничними умовами для потоку у відцентровому компресорі є параметри рідкого CO₂ на вході та CO₂ у надкритичній області на виході. Проблемою розрахунку може стати погана збіжність розв'язку під час переходу між областями. Рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є було модифіковано для моделювання термодинамічних властивостей рідкого CO₂ з меншою похибкою, ніж оригінальне рівняння стану. В області критичної точки, через яку буде проходити зміна фаз, спостерігаються значні флуктуації термодинамічних показників, таких як тиск, температура та густина, які призводять до труднощів у досягненні результату 3D AxCFD™ та знижують достовірність результатів аж до повної неможливості отримати рішення, що зійшлося.

Якщо граничні умови (ГУ) на вході знаходяться поблизу критичної області та пов'язані з фазовим переходом, то було прийнято наступний алгоритм досягнення збіжності розрахунку:

- використовувати повну ентальпію замість повної температури на вході до компресора, як граничну умову;
- результат розрахунку з нестислою рідиною був використаний як початкове наближення.

Робоче тіло CO₂ описується властивостями, необхідними для обраного рівняння стану і включає:

- параметри в критичній точці: тиск, температура та густина (7.377МПа; 304.13К; 467.6кг/м³);
- коефіцієнт ацентричності (0.224);
- молярна маса (44.01 кг/кмоль);
- поліноміальні коефіцієнти A1-A5 (які є функцією Cp0(T));

- референсну точку: тиск, температура, внутрішня енергія та ентропія (параметри взяті для 500K та 1 МПа з NIST RefPROP);
- масштабну поправку для рідкої області CO₂.

Граничні умови, що використовуються для розрахунку:

- повна ентальпія на вході - 295.29 кДж/кг;
- повний тиск на вході - 7.32 МПа;
- масові витрати на виході – 1.5 кг/с;
- частота обертання - 40000 об/хв.

Як модель турбулентності була обрана k-Epsilon та інтенсивність турбулентності - 1%. Детальна інформація про обрану модель описано в розділі 3. Результати, отримані під час рішення, занесено до таблиці 6.1.

Результати 3D AxCFD™ на вході та на виході відцентрового компресора нанесено на діаграму T-S, отриману по результатам експерименту. Аналіз розрахунку у 3D AxCFD™ показав близькі результати до експериментальних даних з моделюванням фазового переходу (рис. 6.1). Похибка для ступеня підвищення тиску не перевищує 5%, а похибка для коефіцієнта корисної дії не перевищує 2%.

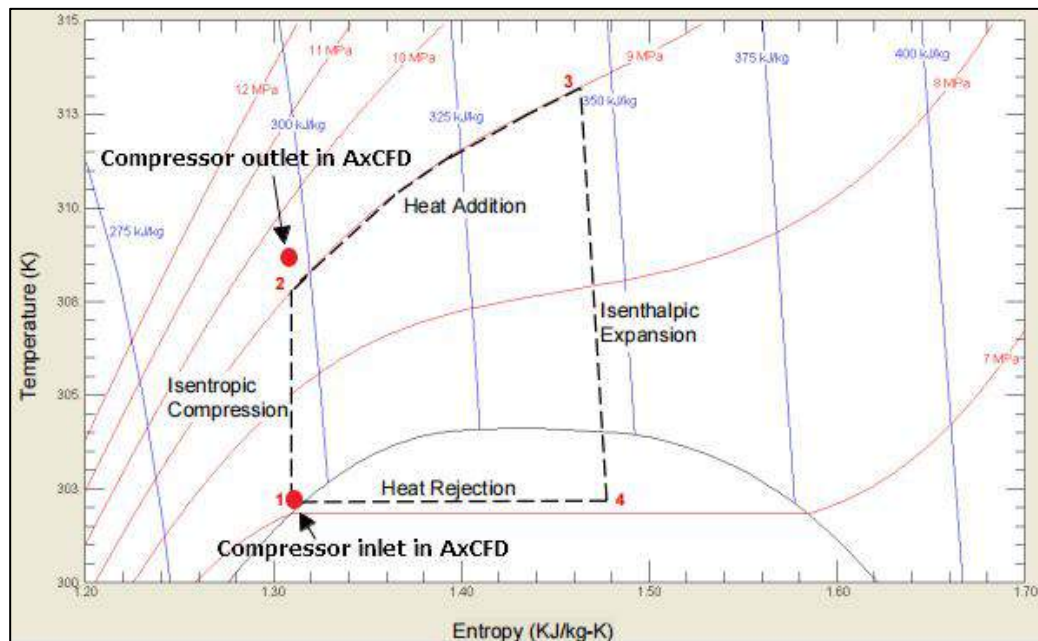


Рис. 6.1. T-S діаграма CO₂, з умовами експериментального циклу та результатами з 3D AxCFD™

Таблиця 6.1 Порівняльний аналіз 3D результатів із експериментальними даними

Параметри	Одиниці вимірювання	3D AxCFD™	Результати експерименту	1D AxSTREAM®
		вхід		
Pt	МПА	7.32		
It	кДж/кг	295.29		
Tt	К	288.14	296	300.5
Rho	кг/м³	530.57	640.74	583.25
Фаза	-	рідка	рідка	рідка
		вихід		
Pt	МПА	9.43	9	9.61
It	кДж/кг	299.28	303.4	299.81
Tt	К	309.9	308.15	306.5
Rho	кг/м³	615.6	645.28	604.97
Фаза	-	надкритична	надкритична	надкритична
		Параметри компресора		
Масові витрати	кг/с	1.5	1.5	1.5
Ступінь стиснення тиску	-	1.288	1.23	1.31
Похибка	%	4.778	-	6.5
ККД	-	0.781	0.768	0.79
Похибка	%	1.3	-	2.86

Картина течії в компресорі для проектної точки з рідким CO₂ на вході до компресора показана на рис. 6.2 - 6.7.

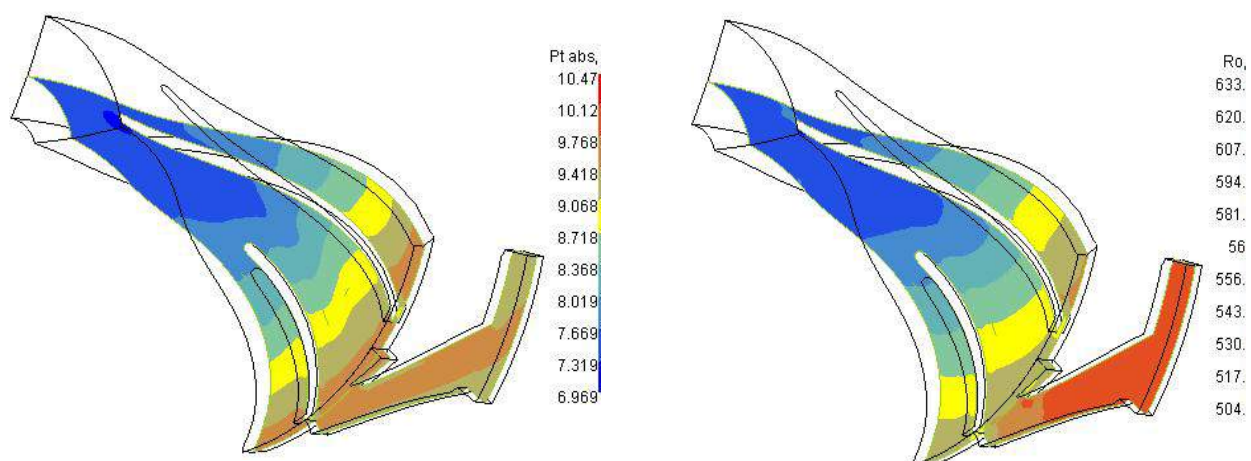


Рис. 6.2. Розподіл повного тиску та густини в компресорі на середньому перерізі

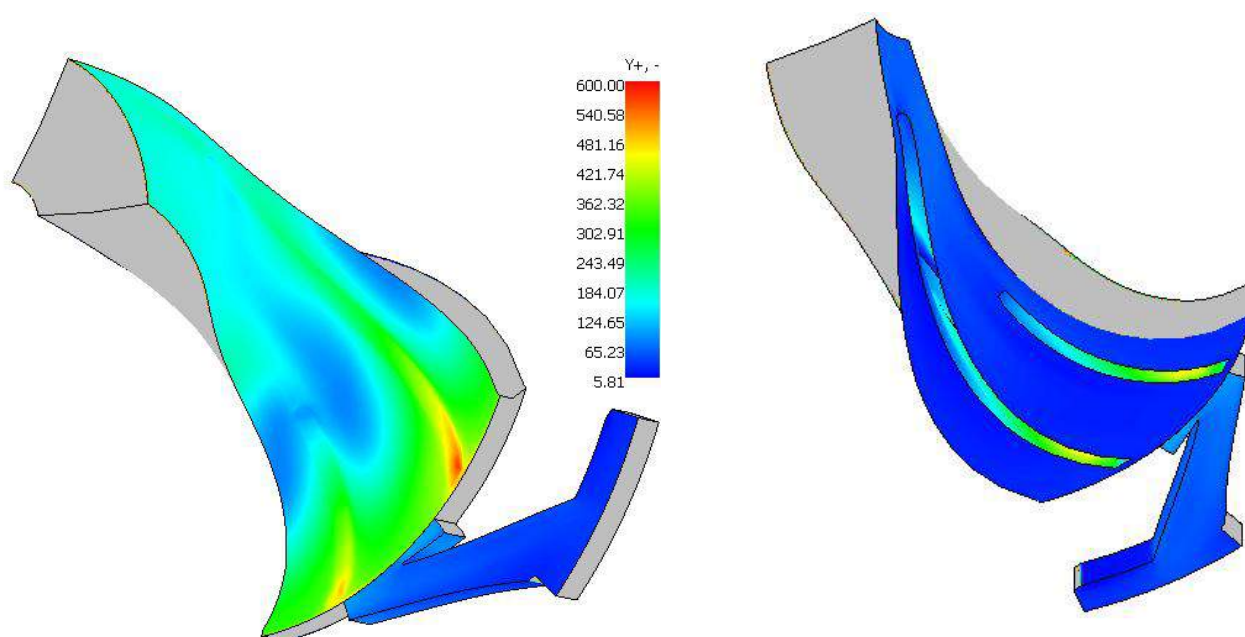


Рис. 6.3. Розподіл параметру Y^+

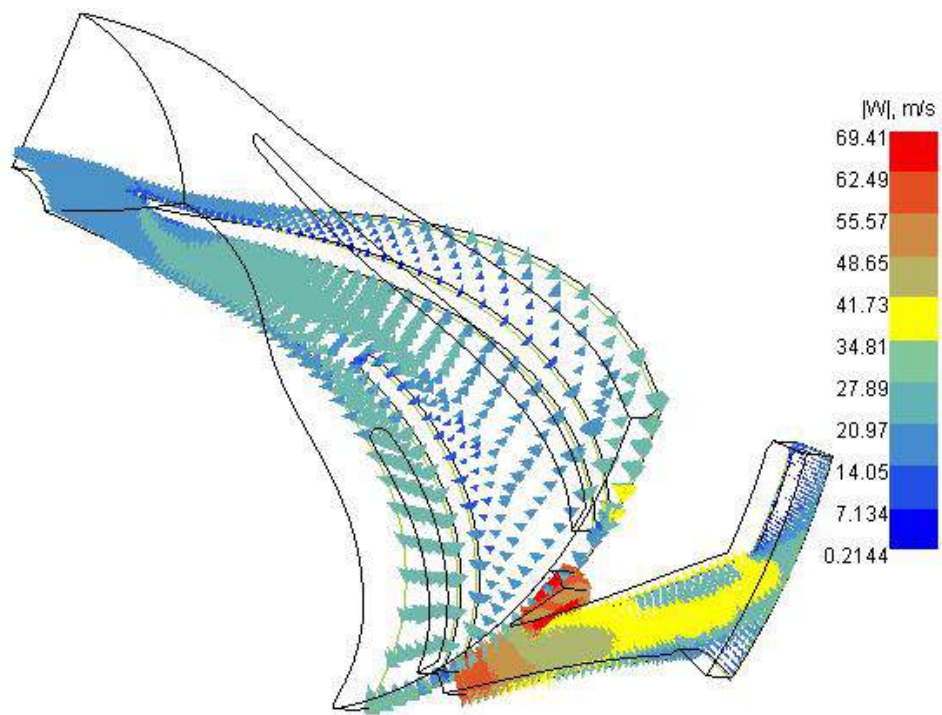


Рис. 6.4. Вектори відносної швидкості в компресорі в кореновому перерізі (10% від втулки)

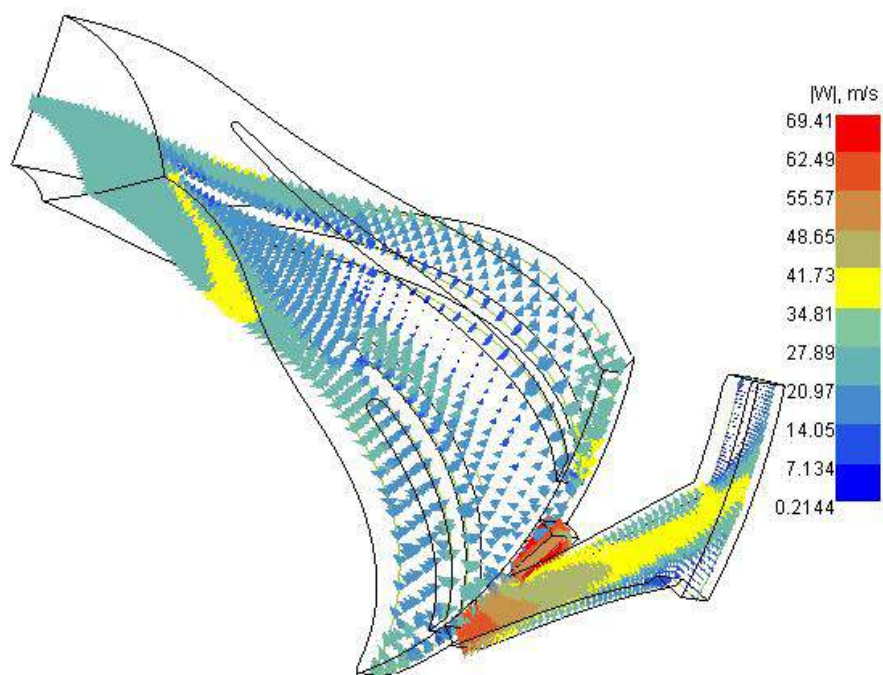


Рис. 6.5. Вектори відносної швидкості в компресорі на середньому перерізі (50% від втулки)

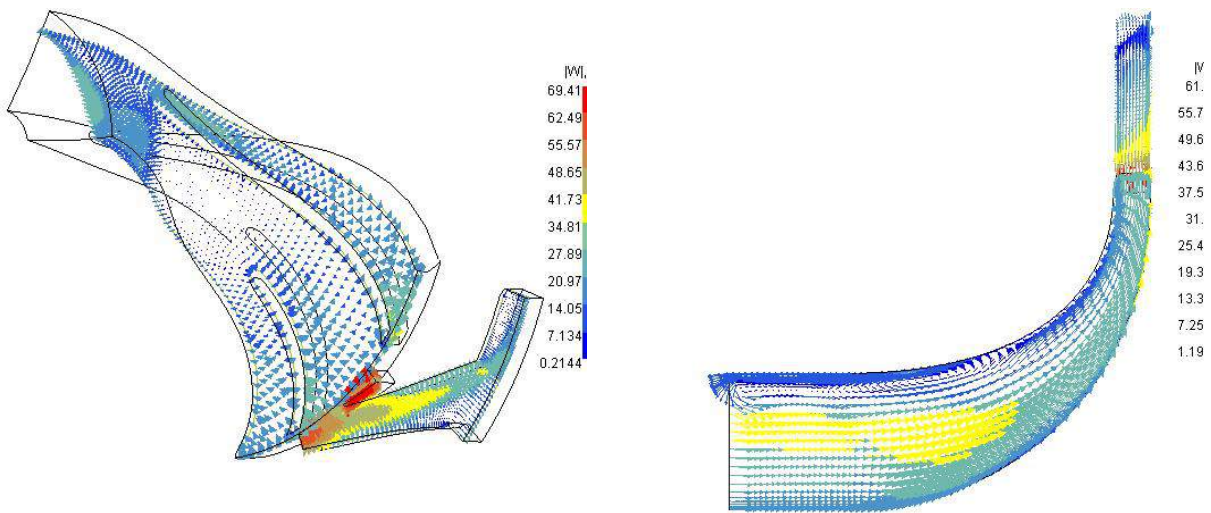


Рис. 6.6. Вектори відносної швидкості в компресорі на периферійному перерізі (80% від втулки) та на меридіональному перерізі

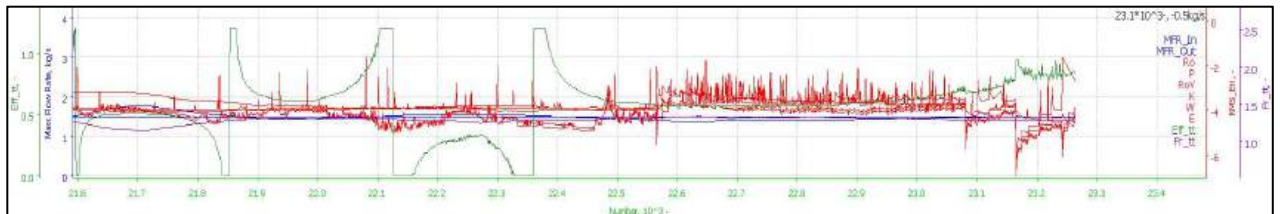


Рис. 6.7. Історія збіжності в 3D AxCFD™

Результати розрахунку в 3D AxCFD™ показують, що солвер моделює фазовий перехід від рідкої фази до надкритичної в безпосередній близькості від критичної точки. В AxCFD™ розбіжність результатів з експериментальними даними може бути пов'язана зі складною структурою програми трьовимірному розрахунку та з недоліками чисельних методів, таких як метод Ньютона чи метод Пегасуса. Ці чисельні методи використовуються для розрахунку термодинамічних параметрів. Проте, модифіковане рівняння Редліха-Квонга-Анг'є можна використовувати для моделювання фазового переходу, бо оригінальне кубічне рівняння чи таблична форма запису робочого тіла не дають змоги моделювати фазовий перехід зі збереженням збіжності рішення. Нестисле робоче тіло також не можна використовувати для розрахунків, бо в цьому випадку фазовий перехід не буде відбуватися.

Порівняльний аналіз характеристики відцентрового компресора, отриманої у програмі 1D AxSTREAM®, з проектною точкою, яка отримана з експерименту та в 3D AxCFD™, представлений на рис. 6.8, 6.9.

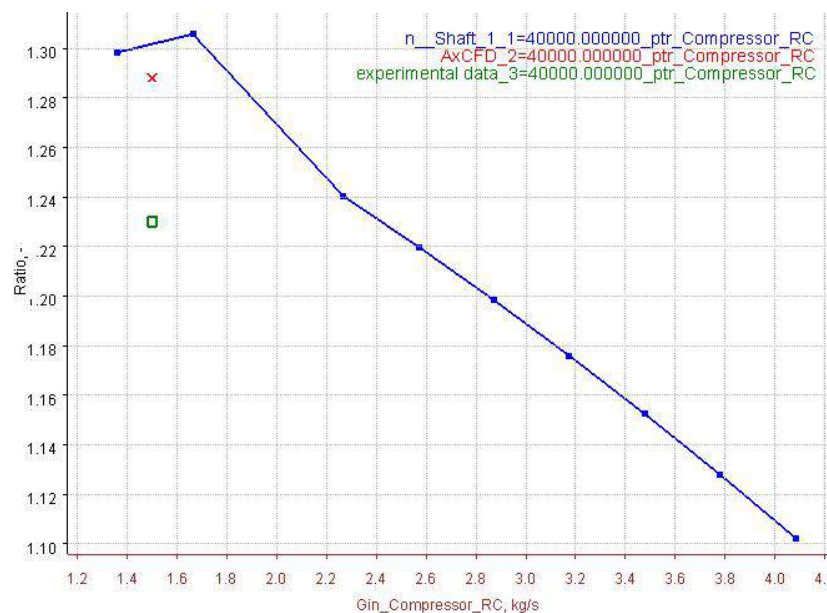


Рис. 6.8. Порівняння результатів для ступеня підвищення тиску відносно масових витрат у AxSTREAM® та AxCFD™ з експериментальною проектною точкою

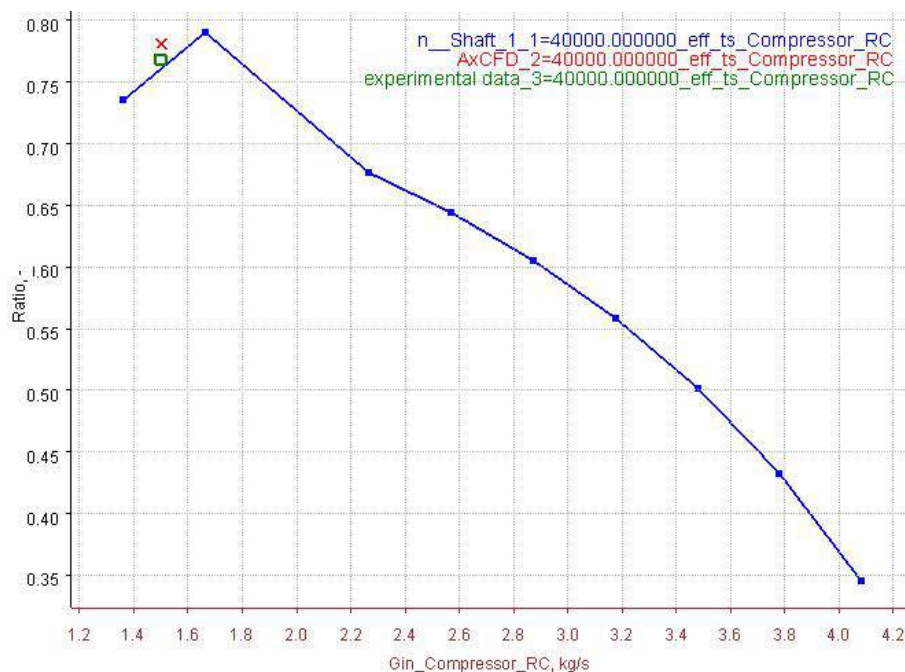


Рис. 6.9. Порівняння результатів для коефіцієнта корисної дії відносно масових витрат у AxSTREAM® та AxCFD™ з експериментальною проектною точкою

Як видно з рис. 6.8, 6.9, проектна точка з AxCFD™ та характеристика компресора з 1D AxSTREAM® мають у межах заданого збіг з експериментальною точкою. У звіті [1], присвяченому проектуванню компресора та проведенню серії експериментів, не приведено робочі характеристики компресора в повній мірі, що робить порівняння термодинамічних результатів для потоку у відцентровому компресорі з експериментальними даними неповним. Однак отримані результати свідчать, що модифікація рівняння стану дозволяє доцільно використовувати його для моделювання потоку з можливими фазовими переходами навколо критичної точки робочого тіла.

6.2 Математичне моделювання двофазної області CO₂

Відцентровий компресор, розроблений у 1D AxSTREAM®, був імпортований у 3D AxCFD™ для подальшого моделювання потоку у двофазній області CO₂ на вході до компресора та в рідкій області на виході з компресора. Проблемою розрахунку може стати погана збіжність рішення під час переходу між областями. Крім того, граничні умови на вході до компресора знаходяться в безпосередній близькості від лінії насичення, а температура на виході з компресора близька до температури критичної точки. Тиск насиченої пари знаходиться за рівнянням Лі-Кеслера замість кубічного рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є. Порівняльний аналіз значень тиску насиченої пари, отриманих з рівняння Лі-Кеслера, Редліха-Квонга-Анг'є та з експериментальними даними, описано в розділі 4.

Також у розділі 4 описано спосіб визначення коефіцієнтів вологості/сухості, рохв'язання кубічного рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для визначення об'єму парової фази. Об'єм рідкої фази отримано з рівняння Ямади-Ганна. Коефіцієнти сухості/вологості визначаються у 3D AxCFD™ для входу та для виходу з компресора.

Якщо термодинамічні параметри потоку на вході до компресора знаходяться поблизу лінії насичення, то було прийнято рішення використовувати для математичного моделювання потоку у 3D AxCFD™ повну ентальпію замість повної температури на вході до компресора.

Робоче тіло CO_2 описується властивостями, необхідними для обраного рівняння стану і включає:

- параметри в критичній точці: тиск, температура та густина (7.377МПа ; 304.13К ; 467.6кг/м^3);
- коефіцієнт ацентричності (0.224);
- молярну масу (44.01 кг/кмоль);
- поліноміальні коефіцієнти A1-A5 (які є функцією Cp0(T));
- референсну точку: тиск, температура, внутрішня енергія та ентропія (параметри взяті для 500К та 1 МПа з NIST RefPROP).

Граничні умови, що використовують для розрахунку:

- повна ентальпія на вході - 267.6 кДж/кг ;
- повний тиск на вході - 6.15 МПа ;
- масові витрати на виході – 1.58 кг/с ;
- частота обертання - 40000 об/хв .

Як модель турбулентності була обрана k-Epsilon та інтенсивність турбулентності - 1%. Сітка використовувалася така ж, як для розрахунків у розділі 3.

Картина течії в сходи́нці показана на рис. 6.10 – 6.16.

Результати, отримані під час рішення, занесено до таблиці 6.2.

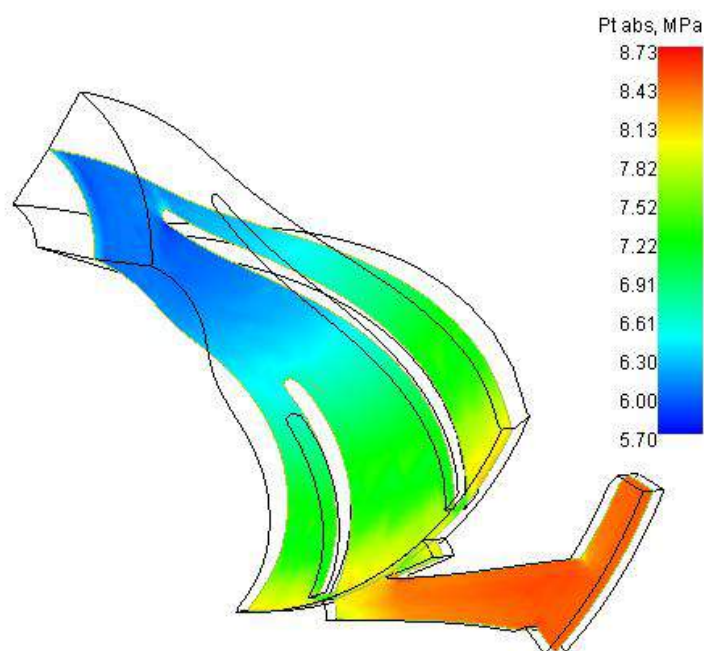


Рис. 6.10. Розподіл повного тиску у компресорі на середньому перерізі

Таблиця 6.2. Порівняльний аналіз 3D AxCFD™ результатів із експериментальними даними та 1D AxSTREAM®:

Параметри	Одиниці вимірювання	3D AxCFD™	Результати експерименту	1D AxSTREAM®
		вхід		
Pt	МПА	6.27	6.15	6.15
It	кДж/кг	303.35	265.82	265.82
Tt	К	266.6	296	292.96
Rho	кг/м³	485.04	643.78	655.66
Ступінь вологості	-	0.912	0.937	-
Фаза	-	двофазна	двофазна	рідка
		вихід		
Pt	МПА	9.53	8.9	8.76
It	кДж/кг	384.4	274.73	270.41
Tt	К	304.9	302.58	298.07
Rho	кг/м³	733.58	748.64	675.82
Фаза	-	Надкритична	рідка	рідка
		Параметри компресора		
Масові витрати	kg/s	1.58	1.58	1.58
Ступінь стиснення тиску	-	1.52	1.41	1.42
Похибка	%	7.8	-	0.7
ККД	-	0.687	0.832	0.85
Похибка	%	-18.4	-	2.16

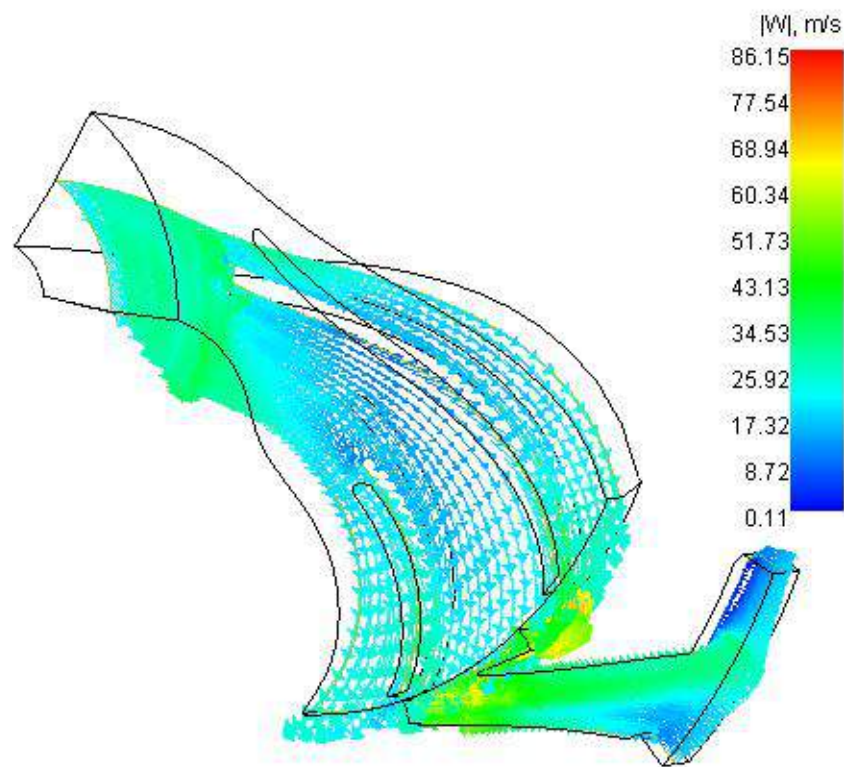


Рис. 6.11. Вектори відносної швидкості в компресорі на середньому перерізі

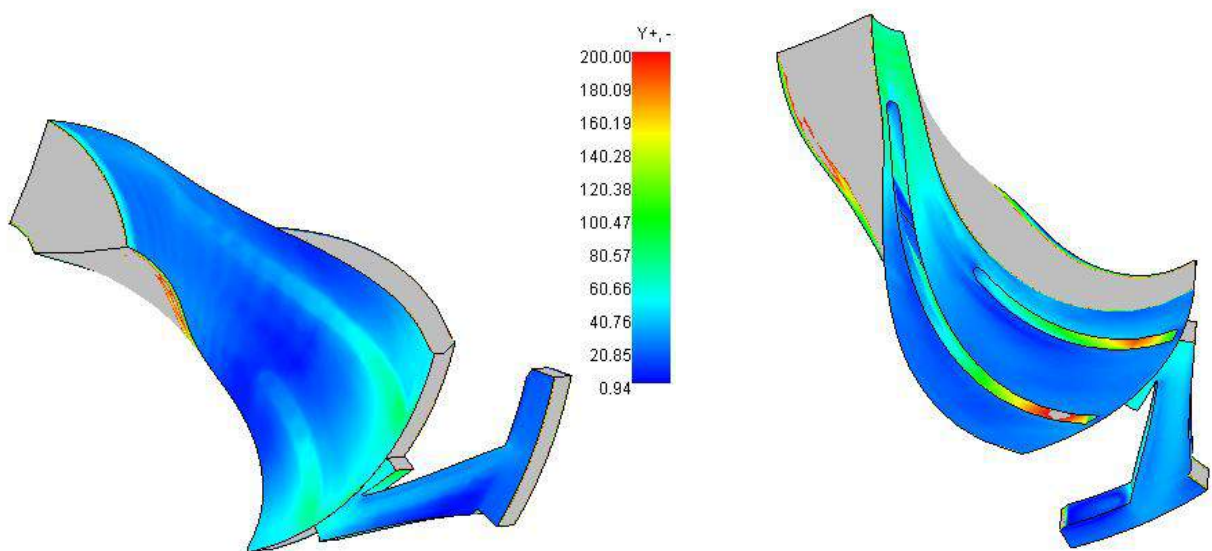


Рис. 6.12. Розподіл параметру Y^+ в компресорі

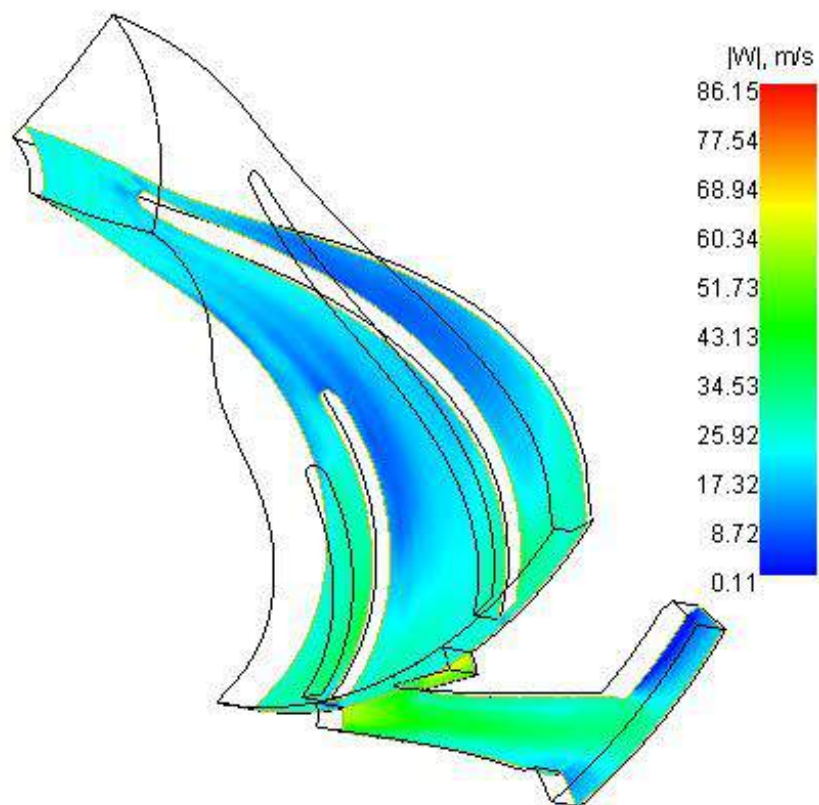


Рис. 6.13. Розподіл відносної швидкості в компресорі на перерізі 10% від кореня

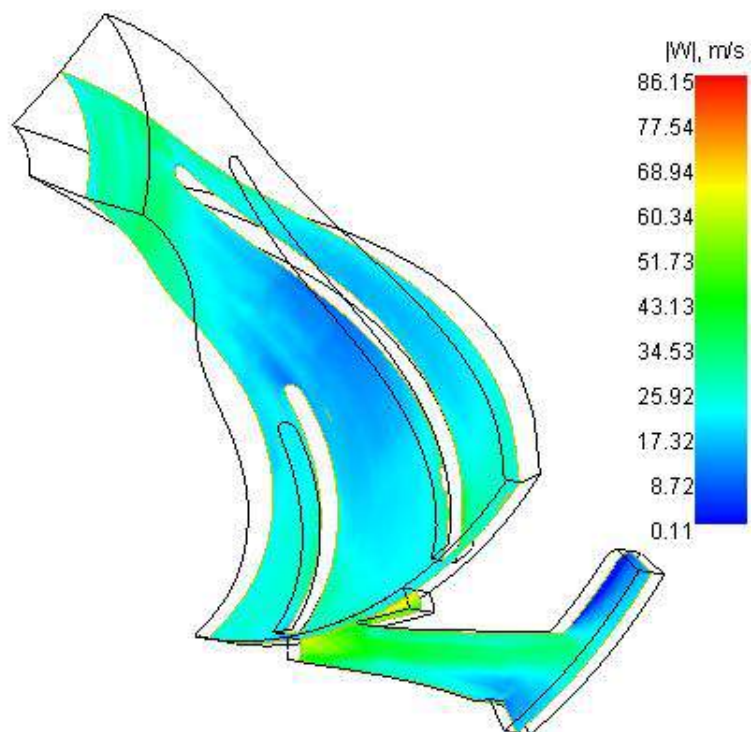


Рис. 6.14. Розподіл відносної швидкості в компресорі на середньому перерізі

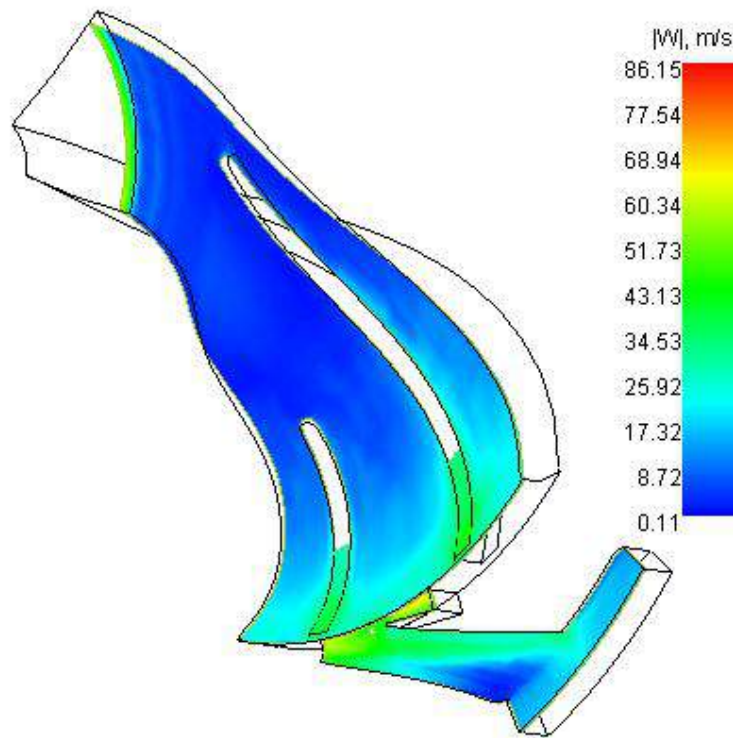


Рис. 6.15. Розподіл відносної швидкості в компресорі на перерізі 90% від кореня

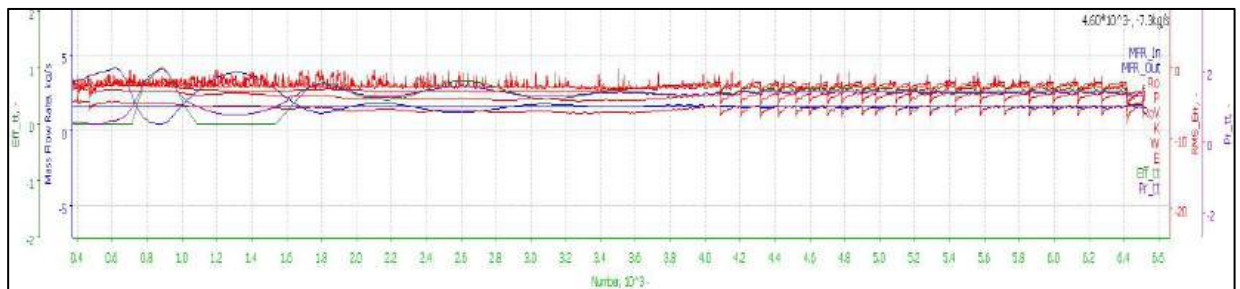


Рис. 6.16. Історія збіжності розрахунку в 3D AxCFD™

Розподіли параметрів, показані на рис. 6.10 – 6.16, наочно демонструють флуктуації термодинамічних параметрів, які мають значний вплив на збіжність розрахунку та на точність отриманих результатів. Умови роботи компресора на вході для цього розрахунку знаходяться безпосередньо на лінії насичення, яка є межею між двофазною областю та рідкою фазою, а на виході - у області критичної точки, на межі між рідкою та надкритичною областями. Безперечною перевагою використання модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є є можливість розрахунку компресора, робоче тіло якого знаходиться в фазовому переході поблизу критичної точки. Звичайно, компресор не може функціонувати тривалий

час у таких умовах, але розроблене рівняння стану дозволяє моделювати перехід із однієї фази до іншої в 3D AxCFD™.

Порівняльний аналіз характеристики відцентрового компресора, отриманої у програмі 1D AxSTREAM®, з проектною точкою, яка отримана з експерименту та в 3D AxCFD™, представлений на рис. 6.17, 6.18.

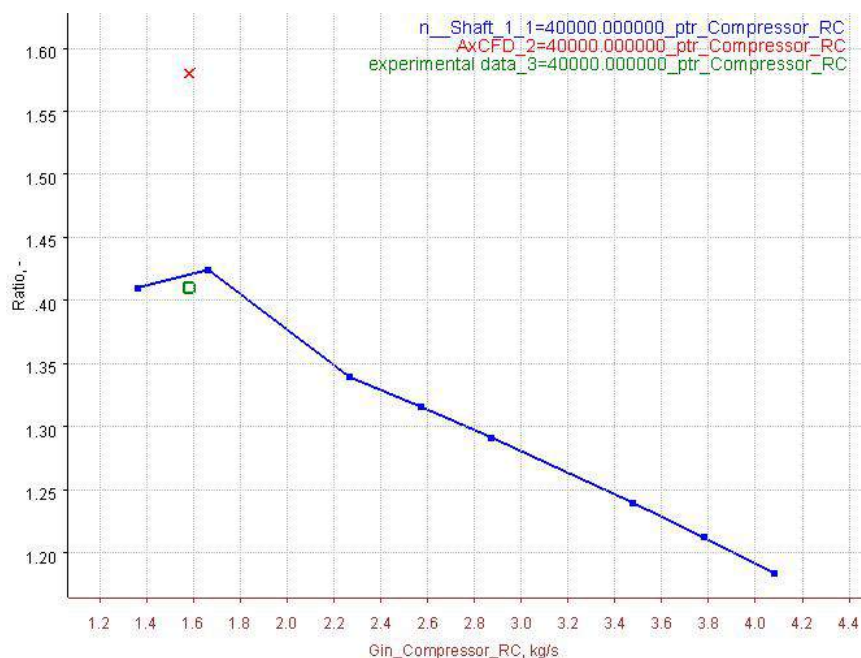


Рис. 6.17. Порівняння результатів для ступеня підвищення тиску відносно масових витрат у AxSTREAM® та AxCFD™ з експериментальною проектною

ТОЧКОЮ

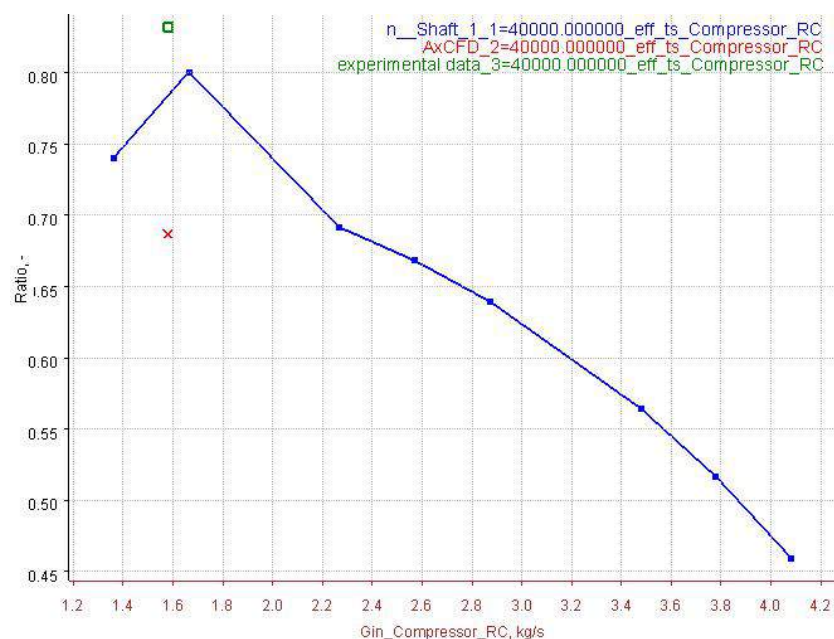


Рис. 6.18. Порівняння результатів для коефіцієнта корисної дії відносно масових витрат у AxSTREAM® та AxCFD™ з експериментальною проектною

Як видно з рис. 6.17, 6.18, проектна точка з AxCFD™ та характеристика компресора з 1D AxSTREAM®, мають у межах заданого збіг з експериментальною точкою. У звіті [1], присвяченому проектуванню компресора та проведенню серії експериментів, не приведено робочі характеристики компресора в повному обсязі, що робить порівняння термодинамічних результатів для потоку у відцентровому компресорі з експериментальними даними неповним. Однак отримані результати свідчать, що модифікація рівняння стану дозволяє доцільно використовувати його для моделювання потоку з фазовими переходами з рідкої фази до двофазної та до надкритичної області навколо критичної точки робочого тіла.

6.3 Висновки до шостого розділу

1. Імпортовано у 3D AxCFD™ модель відцентрового компресора, яку було розроблено у 1D AxSTREAM®, для подальшого моделювання потоку з фазовими переходами навколо критичної точки CO₂ при наступних умовах: 1. У двофазній області CO₂ на вході до компресора та в рідкій області на виході з компресору; 2. У рідкій області CO₂ на вході до компресора та у надкритичній області на виході з компресору.

2. Визначено, що проблемою розрахунків могла стати погана збіжність рішення під час моделювання переходу між областями.

3. Визначено, що граничні умови на вході до компресора знаходяться в безпосередній кількості від лінії насичення, а температура на виході з компресора близька до критичної. Тиск насиченої пари знаходиться за рівнянням Лі-Кеслера, замість кубічного рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є.

4. Встановлено, що для розрахунку компресора з рідкою фазою CO₂ на вході, в області критичної точки, через яку буде проходити зміна фази, спостерігаються значні флуктуації термодинамічних показників, таких як тиск, температура та густина, які призводять до труднощів у досягненні сталого розрахунку та достовірності отриманих результатів аж до повної неможливості отримати рішення, що зійшлося.

6. Визначено, що проектна точка з AxCFD™ та характеристика компресора з 1D AxSTREAM® мають у межах заданого збіг з експериментальною точкою для ступеня підвищення тиску та коефіцієнта корисної дії. У звіті [1], присвяченому проектуванню компресора та проведенню серії експериментів, немає достатньої кількості інформації про робочі характеристики компресора. Приведені лише результати експериментів з продувки компресора в проектній точці, що робить порівняння модифікованого в даній роботі рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є неповним. Однак отримані результати свідчать про те, що модифікація рівняння стану дозволяє доцільно використовувати його для моделювання потоку з фазовими переходами з рідкої фази до двофазної та до надкритичної області навколо критичної точки робочого тіла.

Результати, які отримано в шостому розділі, опубліковано в роботі [2].

6.4 Література до шостого розділу

- [1] Wright, S. A., Pickard, P. S., Fuller, R., Radel, R. F., & Vernon, M. E. (2009). Supercritical CO₂ Brayton Cycle Power Generation Development Program And Initial Test Results. *ASME 2009 Power Conference*. <https://doi.org/10.1115/power2009-81081>
- [2] Vorobiova, Hanna & Dolmatov, Dmytro & Fesenko, Kseniia & Sysoiev, Iurii & Dehtiarov, Oleh & Ivashchenko, Maryna. (2024). Effect detection of using a modified Redlich-Kwong-Aungier equation of state on the calculation of carbon dioxide flow in a centrifugal compressor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2. 54-65. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.

ВИСНОВКИ

У результаті комплексного дослідження розв'язано науково-практичну задачу моделювання фазових переходів у відцентровому компресорі, що дозволяє описати всю робочу область CO_2 у надкритичній, газовій, двофазній, рідкій, а також у області критичній точці. діоксид вуглецю є широко використовуваним робочим тілом, так як при достатньо низькій температурі кипіння відносно температури навколишнього середовища має високе значення густини у рідкому стані та значний перепад густини від надкритичного до рідкого стану в околицях критичної точки. Саме тому для забезпечення найбільш ефективної роботи холодильної установки доцільно використовувати діоксид вуглецю, який знаходиться у непосредній близькості до критичної точки. Цикл «конденсації» CO_2 , описаний у дисертаційній роботі, забезпечує ефективність перетворення до 39% (порівняно з 34% для циклу без охолоджувача) за рахунок зниження температури на вході компресора до 295K, закачування рідкого CO_2 у компресор та примусової конденсації парів CO_2 у охолоджувачі. Оскільки вхідні властивості компресора циклу S- CO_2 знаходяться у області навколо критичної точки, невеликі зміни вхідних властивостей компресора можуть суттєво вплинути на термодинамічні властивості потоку у компресорі та у наступних компонентів холодильної установки. Це, у свою чергу, може вплинути на процес стиснення, що може знизити ефективність системи, а також запас помпаж компресора, що має вирішальне значення для експлуатаційної безпеки системи. Прийнятною точністю для порівняння між результатами розрахунку термодинамічних умов потоку у компресорі циклу S- CO_2 та експериментальними даними було обрано 5%.

Було підсумовано напрямки для подальшої дослідницької роботи з S- CO_2 циклами:

- реальний газовий ефект повинен бути включений до чисельних моделей для підвищення точності проектування.
- технічні питання підшипників, ущільнень та ротодинамічної стійкості повинні бути ретельно вирішені.

Разом з прагненням до підвищення ефективності циклу, покращенням економічних показників та більшого розповсюдження у енергетичній галузі, були виділені такі недоліки, які заважають комерційному та широкому застосуванню циклів S-CO₂:

(1) Відсутня методологія проектування та аналізу систем для циклів S-CO₂, що приводяться у дію різними джерелами тепла, у проектних/непроектних умовах та у перехідних режимах.

(2) Механізми теплопередачі та перетворення тепла на енергію у циклах S-CO₂ не повністю вивчені, що перешкоджає точному проектуванню та оцінці ключових компонентів.

(3) Існують різні технічні недоліки технології виготовлення, систем ущільнення, та стабільності з точки зору роторної динаміки для різних теплообмінників та турбомашин.

Метою даної роботи були зосередження на реальному газовому ефекті, який був включений до чисельної моделі для підвищення точності проектування; розробка та застосування моделі модифікованого рівняння стану, яка може описати весь робочий діапазон CO₂ від двофазної до надкритичної областей з прийнятною для розрахунків похибкою для досягнення найбільшої ефективності та підвищення стійкості роботи відцентрового компресора.

Розглянуто актуальну проблему моделювання процесів у відцентровому компресорі, коли робоче тіло знаходиться в безпосередній близькості до критичної точки. Відомо, що найбільш ефективно цикли S-CO₂ використовуються поблизу критичної точки робочого тіла. Однак у цій області теплофізичні властивості CO₂ дуже чутливі до змін тиску та температури. Розглянуто різноманітні математичні моделі рівнянь стану реального газу, які здатні описати фазові переходи першого та другого рівнів. Основним недоліком цих досліджень є значна похибка відносно результатів експериментів для S-CO₂ циклів, які використовуються в безпосередній близькості до критичної точки CO₂.

У ході виконання дисертаційних досліджень було отримано нові науково-практичні результати:

1. Розроблено математичну модель модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є, що дозволяє описати всю робочу область CO_2 у надкритичній, газовій, двофазній, рідкій, а також у області критичної точки.

2. Встановлено, що рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є в немодифікованому вигляді добре збігається з експериментальними даними для широкого діапазону температур у надкритичній та газовій областях. Для газової від 220 К до 300 К (мінімальна температура CO_2 216.59 К, критична температура 304.13 К).

3. Розроблено масштабні поправки до коефіцієнту рівняння $A(T)$ в моделі стану Редліха-Квонга-Анг'є, що дозволило істотно знизити похибку у визначенні тиску порівняно з немодифікованим рівнянням стану. Для рідкого стану розглядалася температурна область від 220 К до 300 К. Для визначення тиску насиченої пари використовувався метод Лі-Кеслера. Порівняння експериментальних і розрахункових значень тиску показало у межах заданого збіг. Для двофазної області розглядався температурний діапазон від 216,6 К до 304,12 К. Отриманий за методом Лі-Кеслера тиск насиченої пари використовувався при розв'язанні кубічного рівняння Редліха-Квонга-Анг'є для визначення об'єму газової фази. Об'єм рідкої фази визначався за емпіричним методом Ямади-Ганна. Порівняння об'ємів газової та рідкої фази показало задовільний збіг з експериментальними даними (для температури 296 К і 303 К).

4. Запропонована в роботі математична модель визначення ступеня сухості на двофазній ділянці CO_2 , що використовує за основу модифіковане рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є та метод Ямади-Ганна, дозволяє отримати значення об'ємів газової та рідкої фази з хорошою точністю порівняно з базовими значеннями. Отримані результати для ступеня сухості добре збігаються з базовими значеннями, що забезпечує придатність запропонованої математичної моделі в усій двофазній ділянці, обмеженій температурним діапазоном від 220 до 300 К.

5. Впроваджено масштабні коефіцієнти для коректного переходу через лінію насичення без великої похибки; для солвера ті ж рівняння використовуються також при відхиленні температури від лінії насичення на 20 К в рідкій області та на 5 К у газовій області.

6. Розроблено програму для одновимірного розрахунку термодинамічних параметрів реального газу в інтегрованому середовищі Visual Studio в консольному додатку, написаному на мові C++.

7. Доповнено математичну модель для розрахунку термодинамічних параметрів реального газу в двофазній області. При валідації математичної моделі на практичному прикладі у AxCFD™ виявлено недоліки базового способу визначення об'єму газової фази. У випадку, коли робоче тіло перебуває в стані фазового перетворення, знаходження коренів кубічного рівняння ускладнено різкими коливаннями температури, густини та тиску. Для практичного застосування спосіб знаходження коефіцієнтів вологості/сухості було спрощено.

8. Встановлено, що для розрахунку компресора з рідкою фазою CO₂ на вході, в області критичної точки, через яку буде проходити зміна фази, спостерігаються значні флуктуації термодинамічних показників, таких як тиск, температура та густина, які ускладнюють забезпечення стійкого розрахунку та отримання достовірних результатів аж до повної неможливості отримати розрахунок, що зійшовся.

9. Результати, отримані за допомогою AxCFD™, свідчать про те, що модифіковане рівняння стану дозволяє доцільно використовувати для валідації експериментальних даних як для проектної точки з моделюванням фазових переходів вздовж лінії насичення, так і в безпосередній близькості до критичної точки.

10. Перевагою розробленої математичної моделі є те, що завдяки простій формі рівняння стану та невеликій кількості емпіричних коефіцієнтів отриману математичну модель можна використовувати для практичних завдань обчислювальної гідродинаміки без великих витрат на обчислення.

Перспективними напрямками подальших досліджень є:

- впровадження математичної моделі модифікаційного рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для будь-яких чистих реальних газів;
- впровадження математичної моделі модифікаційного рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є для будь-яких сумішей реальних газів;

- моделювання формування бульбашок у двофазній області реального газу.

Ступінь достовірності результатів базується на валідації результатів тривимірного розрахунку в програмному пакеті обчислювальної математики FEA 3D AxCFD™ з результатами серії експериментів, отриманими для відцентрового компресора циклу S-CO₂. Також розроблена математична модель модифікованого рівняння стану Редліха-Квонга-Анг'є була порівняна з рівнянням стану Спана-Вагнера, яка є базовим рівнянням моделювання CO₂ для програми mini-NIST RefPROP та має найвищу серед наявних методів точність з експериментальними даними в усьому діапазоні роботи CO₂.

ДОДАТОК А: ЧИСЕЛЬНЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ДАНИХ ДЛЯ ІЗОТЕРМ ГАЗОВОЇ ОБЛАСТІ

Ізотерма 220К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
220	1	41330	41361.25	0.08
220	0.5	82192	82285.74	0.11
220	0.33333	122590	122775.80	0.15
220	0.25	162520	162828.89	0.19
220	0.2	201980	202449.76	0.23
220	0.16667	240980	241633.62	0.27
220	0.14286	279510	280390.19	0.31
220	0.125	317580	318722.74	0.36
220	0.11111	355180	356624.25	0.41
220	0.1	392320	394091.02	0.45
220	0.090909	428990	431134.72	0.50
220	0.083333	465190	467753.60	0.55
220	0.076923	500930	503945.16	0.60
220	0.071429	536210	539710.94	0.65
220	0.066667	571020	575058.01	0.71
220	0.063221	599130	603644.45	0.75

Ізотерма 240К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
240	1	45134	45160.09	0.06
240	0.5	89852	89921.05	0.08
240	0.33333	134150	134285.26	0.10
240	0.25	178040	178249.81	0.12
240	0.2	221520	221819.71	0.14

240	0.16667	264580	264989.53	0.15
240	0.14286	307230	307769.82	0.18
240	0.125	349470	350164.05	0.20
240	0.11111	391300	392164.27	0.22
240	0.1	432710	433766.22	0.24
240	0.090909	473720	474982.66	0.27
240	0.083333	514320	515811.47	0.29
240	0.076923	554500	556249.69	0.32
240	0.071429	594280	596298.85	0.34
240	0.066667	633660	635966.67	0.36
240	0.0625	672620	675252.49	0.39
240	0.058824	711180	714146.5444	0.42
240	0.055556	749330	752663.0838	0.44
240	0.052632	787070	790798.1257	0.47
240	0.05	824410	828558.6983	0.50
240	0.047619	861350	865934.8145	0.53
240	0.045455	897880	902922.8153	0.56
240	0.043478	934000	939555.376	0.59
240	0.041667	969720	975786.4273	0.63
240	0.04	1005000	1011660.925	0.66
240	0.038462	1040000	1047143.065	0.69
240	0.037037	1074500	1082274.762	0.72
240	0.035714	1108600	1117028.885	0.76
240	0.034483	1142300	1151390.113	0.80
240	0.033333	1175600	1185412.694	0.83
240	0.032258	1208500	1219040.697	0.87
240	0.03125	1241000	1252306.272	0.91
240	0.030303	1273100	1285207.568	0.95
240	0.030034	1282500	1294861.523	0.96

Изотерма 260K

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
260	1	48933	48956.66408	0.05
260	0.5	97491	97547.32876	0.06
260	0.33333	145670	145774.4425	0.07
260	0.25	193490	193634.6866	0.07
260	0.2	240920	241133.388	0.09
260	0.16667	287990	288264.4722	0.10
260	0.14286	334690	335039.3189	0.10
260	0.125	381020	381461.5914	0.12
260	0.11111	426970	427522.4789	0.13
260	0.1	472560	473217.1109	0.14
260	0.090909	517780	518559.3629	0.15
260	0.083333	562640	563546.7557	0.16
260	0.076923	607130	608175.893	0.17
260	0.071429	651250	652448.2779	0.18
260	0.066667	695010	696372.3093	0.20
260	0.0625	738410	739947.1213	0.21
260	0.058824	781440	783161.7011	0.22
260	0.055556	824110	826031.7223	0.23
260	0.052632	866420	868552.6064	0.25
260	0.05	908370	910732.0479	0.26
260	0.047619	949960	952558.7322	0.27
260	0.045455	991190	994028.3553	0.29
260	0.043478	1032100	1035177.425	0.30
260	0.041667	1072600	1075954.016	0.31
260	0.04	1112700	1116408.533	0.33
260	0.038462	1152500	1156500.434	0.35
260	0.037037	1192000	1196276.925	0.36
260	0.035714	1231100	1235707.174	0.37
260	0.034483	1269800	1274773.528	0.39
260	0.033333	1308200	1313537.524	0.41

260	0.032258	1346200	1351935.279	0.43
260	0.03125	1383900	1390003.249	0.44
260	0.030303	1421200	1427739.167	0.46
260	0.029412	1458200	1465127.764	0.48
260	0.028571	1494800	1502223.462	0.50
260	0.027778	1531100	1538926.936	0.51
260	0.027027	1567000	1575340.311	0.53
260	0.026316	1602600	1611398.624	0.55
260	0.025641	1637800	1647151.505	0.57
260	0.025	1672700	1682561.643	0.59
260	0.02439	1707300	1717659.37	0.61
260	0.02381	1741500	1752372.227	0.62
260	0.023256	1775300	1786819.484	0.65
260	0.022727	1808800	1820953.869	0.67
260	0.022222	1842000	1854731.37	0.69
260	0.021739	1874800	1888182.275	0.71
260	0.021277	1907300	1921277.96	0.73
260	0.020833	1939400	1954145.205	0.76
260	0.020408	1971200	1986624.852	0.78
260	0.02	2002700	2018784.478	0.80
260	0.019608	2033800	2050625.019	0.83
260	0.019231	2064600	2082153.935	0.85
260	0.018868	2095000	2113385.503	0.88
260	0.018519	2125100	2144251.423	0.90
260	0.018182	2154900	2174865.194	0.93
260	0.017857	2184300	2205168.519	0.96
260	0.017544	2213400	2235101.201	0.98
260	0.017241	2242200	2264799.766	1.01
260	0.016949	2270600	2294113.458	1.04
260	0.016667	2298700	2323088.543	1.06
260	0.016393	2326500	2351885.751	1.09
260	0.016129	2353900	2380248.942	1.12
260	0.015873	2381000	2408346.035	1.15

260	0.015625	2407700	2436136.12	1.18
260	0.015524	2418800	2447617.985	1.19

Изотерма 280К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
280	1	52728	52751.43802	0.04
280	0.090909	561410	561919.2201	0.09
280	0.047619	1036900	1038397.605	0.14
280	0.032258	1479900	1483130.447	0.22
280	0.02439	1891400	1897054.252	0.30
280	0.019608	2272200	2281021.827	0.39
280	0.016393	2623100	2636075.748	0.49
280	0.014085	2944900	2962788.855	0.61
280	0.012346	3238600	3262384.765	0.73
280	0.010989	3504900	3535611.47	0.88
280	0.009901	3744700	3783198.729	1.03
280	0.009009	3958700	4006054.361	1.20
280	0.0082645	4147700	4204972.049	1.38
280	0.008214	4160700	4218837.277	1.40

Изотерма 300К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
300	1	56521	56544.74534	0.04
300	0.090909	604740	605102.8034	0.06
300	0.047619	1122600	1123598.302	0.09
300	0.032258	1611000	1612944.134	0.12
300	0.02439	2070800	2074048.456	0.16
300	0.019608	2502700	2507728.453	0.20
300	0.016393	2907700	2915020.425	0.25
300	0.014085	3286500	3296422.985	0.30

300	0.012346	3640200	3653193.289	0.36
300	0.010989	3969500	3986043.171	0.42
300	0.009901	4275300	4295655.278	0.48
300	0.009009	4558500	4582933.463	0.54
300	0.0082645	4820000	4848643.721	0.59
300	0.0076336	5060700	5093627.428	0.65
300	0.0070922	5281300	5318638.395	0.71
300	0.0066225	5482900	5524462.09	0.76
300	0.0062112	5666200	5711840.631	0.81
300	0.005848	5832200	5881566.892	0.85
300	0.0055249	5981600	6034413.125	0.88
300	0.0052356	6115400	6171132.079	0.91
300	0.0049751	6234300	6292450.39	0.93
300	0.0047393	6339200	6399118.805	0.95
300	0.0045249	6431000	6491860.445	0.95
300	0.004329	6510600	6571473.395	0.93
300	0.0041494	6578600	6638653.067	0.91
300	0.0039841	6635900	6694163.087	0.88
300	0.0038314	6683300	6738757.355	0.83
300	0.0037232	6713100	6765730.497	0.78

ДОДАТОК Б: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ НАДКРИТИЧНОЇ ОБЛАСТІ

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізоTERM. Температура 305 К

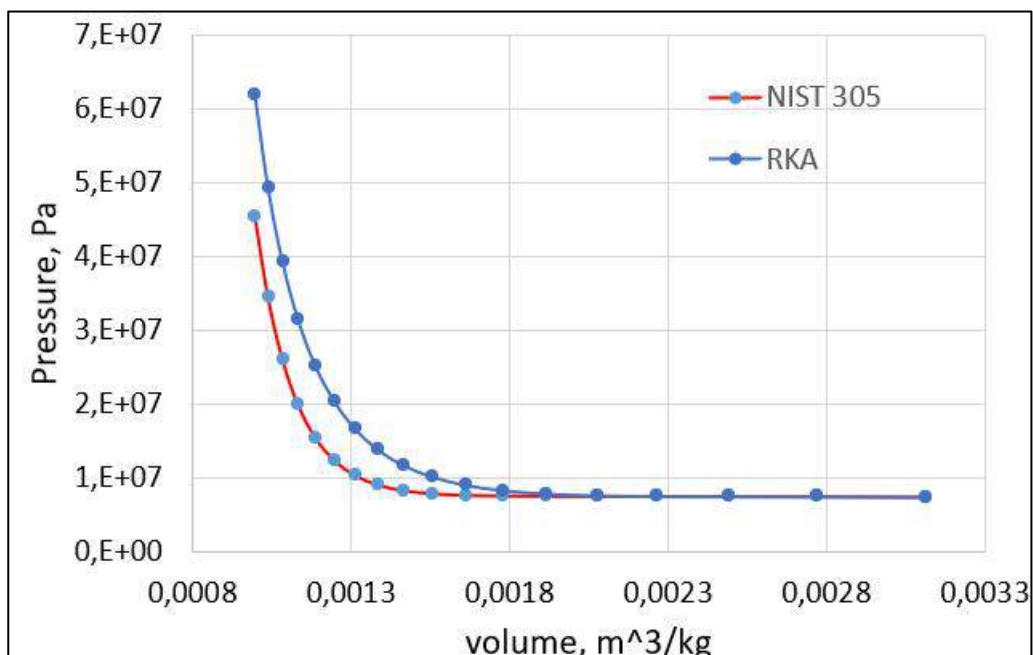


Рис. 1 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізоTERM. Температура 305 К

		NIST	RKA	
T, K	v, m ³ /kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
305	0.0031153	7399800	7416340.284	0.22
305	0.0027701	7474000	7459362.317	-0.20
305	0.0024938	7506300	7470147.639	-0.48
305	0.0022676	7519900	7501281.3	-0.25
305	0.002079	7529000	7608951.744	1.06
305	0.0019194	7540900	7854087.88	4.15
305	0.0017825	7573000	8304248.348	9.66
305	0.0016639	7661400	9034327.852	17.92
305	0.0015601	7867000	10130390.84	28.77
305	0.0014684	8286300	11693673.82	41.12

305	0.001387	9058800	13836373.21	52.74
305	0.0013141	10362000	16701657.38	61.18
305	0.0012484	12416000	20461915.88	64.80
305	0.0011891	15498000	25307615.86	63.30
305	0.0011351	19940000	31514919.88	58.05
305	0.0010858	26118000	39404116.97	50.87
305	0.0010406	34469000	49402156.16	43.32
305	0.000999	45506000	62074640.9	36.41

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 325 К

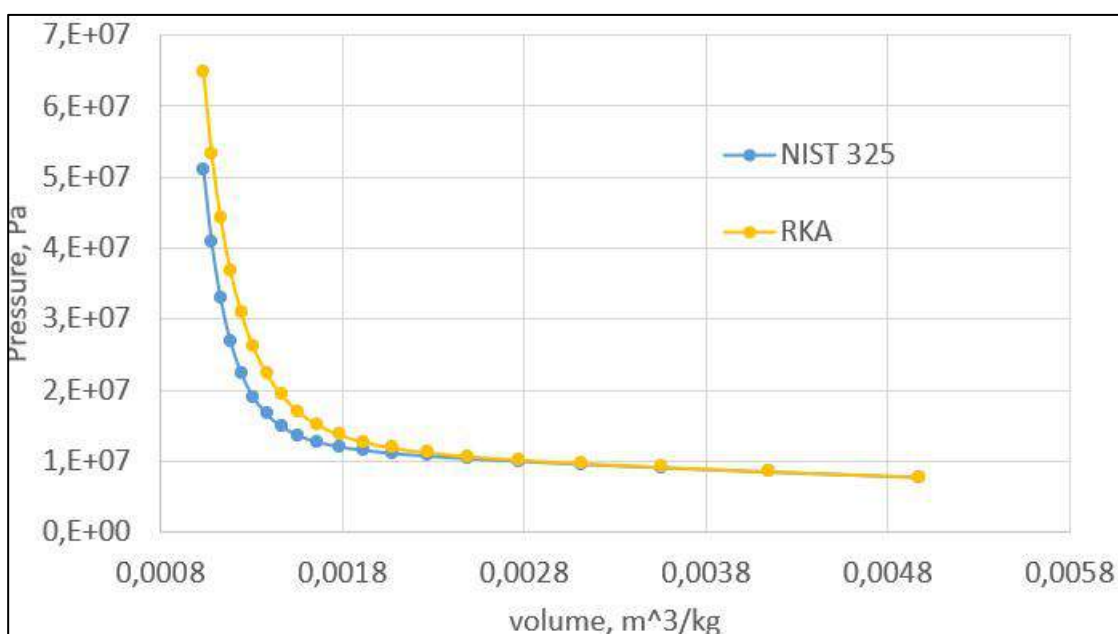


Рис. 2 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 325 К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
325	0.0049751	7756700	7809857.717	0.69
325	0.0041494	8512900	8586294.625	0.86
325	0.0035587	9117600	9217300.207	1.09
325	0.0031153	9610900	9750422.117	1.45
325	0.0027701	10029000	10234742.32	2.05

325	0.0024938	10404000	10720967.13	3.05
325	0.0022676	10763000	11262962.81	4.65
325	0.002079	11139000	11918549.5	7.00
325	0.0019194	11565000	12750526.09	10.25
325	0.0017825	12085000	13829522.68	14.44
325	0.0016639	12760000	15233050.84	19.38
325	0.0015601	13670000	17051675.44	24.74
325	0.0014684	14923000	19392610.47	29.95
325	0.001387	16662000	22372353.37	34.27
325	0.0013141	19075000	26143818.11	37.06
325	0.0012484	22395000	30890043.67	37.93
325	0.0011891	26901000	36810085.14	36.84
325	0.0011351	32923000	44200283.52	34.25
325	0.0010858	40845000	53399745.82	30.74
325	0.0010406	51119000	64862788.55	26.89

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 345 К**

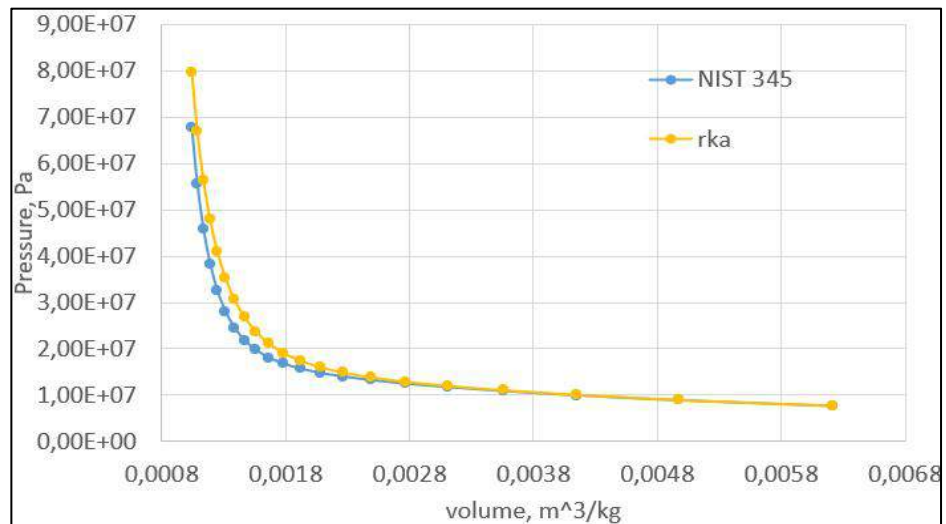
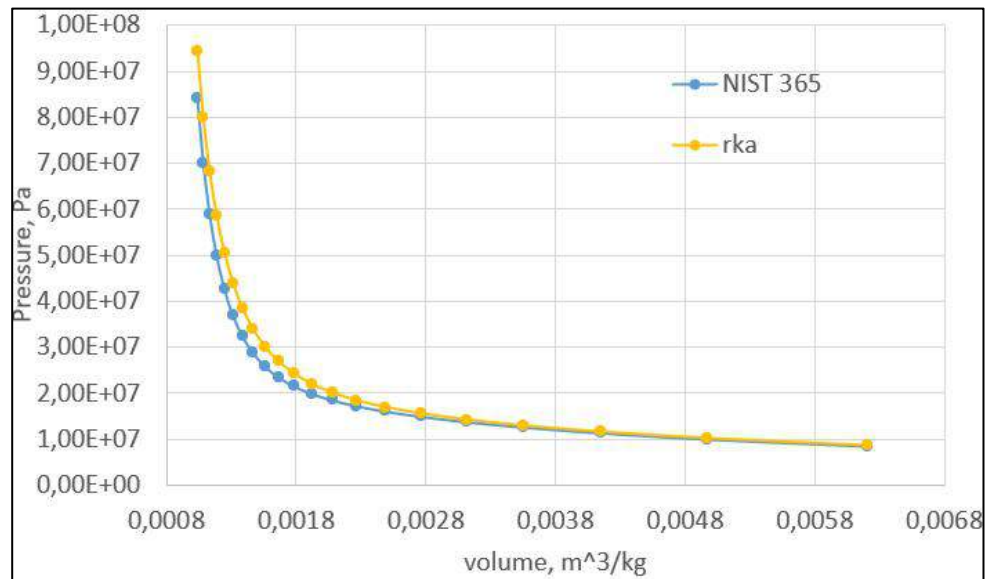


Рис. 3 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 345 К

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
345	0.0062112	7675900	7717504.957	0.54

345	0.0049751	8911900	8984449.682	0.81
345	0.0041494	9972700	10089175.27	1.17
345	0.0035587	10899000	11079296.51	1.65
345	0.0031153	11730000	12002533.66	2.32
345	0.0027701	12501000	12908700.37	3.26
345	0.0024938	13248000	13849304.67	4.54
345	0.0022676	14007000	14879590.14	6.23
345	0.002079	14818000	16059099.7	8.38
345	0.0019194	15729000	17452596.49	10.96
345	0.0017825	16797000	19133842.36	13.91
345	0.0016639	18097000	21183067.52	17.05
345	0.0015601	19725000	23695387.97	20.13
345	0.0014684	21804000	26784024.49	22.84
345	0.001387	24488000	30569911.14	24.84
345	0.0013141	27975000	35215691.63	25.88
345	0.0012484	32508000	40915083.41	25.86
345	0.0011891	38375000	47875902.59	24.76
345	0.0011351	45914000	56414576.83	22.87
345	0.0010858	55519000	66889128	20.48
345	0.0010406	67654000	79781268.01	17.93

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 365 К**



**Рис. 4 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 365 К**

		NIST	RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	rel err %
365	0.0062112	8524600	8575395.064	0.60
365	0.0049751	10035000	10129895.95	0.95
365	0.0041494	11392000	11551129.56	1.40
365	0.0035587	12635000	12886915.3	1.99
365	0.0031153	13802000	14185261.64	2.78
365	0.0027701	14932000	15496810.04	3.78
365	0.0024938	16064000	16873967.62	5.04
365	0.0022676	17242000	18373436.67	6.56
365	0.002079	18513000	20056559.95	8.34
365	0.0019194	19933000	21990144.68	10.32
365	0.0017825	21573000	24251135.46	12.41
365	0.0016639	23518000	26922567.29	14.48
365	0.0015601	25876000	30104150.22	16.34
365	0.0014684	28780000	33915136.67	17.84
365	0.001387	32397000	38481012.04	18.78
365	0.0013141	36936000	43974136.36	19.05

365	0.0012484	42652000	50598930.15	18.63
365	0.0011891	49843000	58572117.05	17.51
365	0.0011351	58858000	68230133.68	15.92
365	0.0010858	70100000	79949998.79	14.05
365	0.0010406	84039000	94240843.31	12.14

ДОДАТОК В: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ РІДКОЇ ОБЛАСТІ

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізоTERM. Температура 220 К

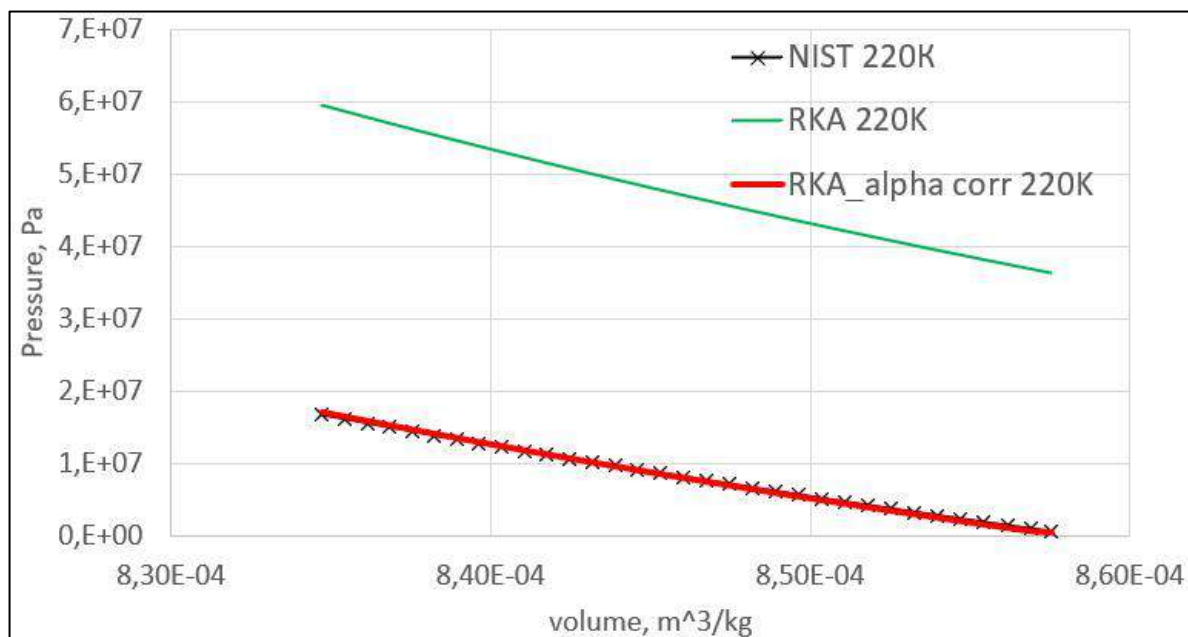


Рис. 1 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізоTERM. Температура 220 К

		NIST	RKA_corr	RKA_corr alpha	P_corr rel err	P_corr alpha rel err	RKA	P rel err
T, K	v, m ³ /kg	P, Pa	P, Pa	P, Pa	%	%	P, Pa	%
220.00	0.00086	599130.00	599130.00	599130.00	0.00	0.00	36288935.34	
220.00	0.00086	985200.00	954139.18	730913.02	-3.15	-25.81	36837283.06	3639.07
220.00	0.00086	1437200.00	1556047.33	1192001.41	8.27	-17.06	37487562.29	2508.37
220.00	0.00086	1892800.00	2156352.86	1651862.13	13.92	-12.73	38135683.71	1914.78
220.00	0.00085	2351900.00	2763229.00	2116756.22	17.49	-10.00	38790473.80	1549.32
220.00	0.00085	2814500.00	3376760.48	2586748.60	19.98	-8.09	39452017.57	1301.74
220.00	0.00085	3280700.00	3997033.42	3061905.24	21.83	-6.67	40120401.41	1122.92
220.00	0.00085	3750400.00	4624135.35	3542293.19	23.30	-5.55	40795713.14	987.77
220.00	0.00085	4223800.00	5249422.93	4021291.26	24.28	-4.79	41468647.24	881.79
220.00	0.00085	4700700.00	5890354.65	4512273.44	25.31	-4.01	42157986.01	796.84

220.00	0.00085	5181300.00	6529459.98	5001856.53	26.02	-3.46	42844932.96	726.91
220.00	0.00085	5665500.00	7175560.93	5496798.58	26.65	-2.98	43538972.81	668.49
220.00	0.00085	6153400.00	7828748.65	5997169.40	27.23	-2.54	44240197.00	618.96
220.00	0.00085	6645000.00	8489115.82	6503040.00	27.75	-2.14	44948698.44	576.43
220.00	0.00085	7140200.00	9156756.64	7014482.54	28.24	-1.76	45664571.63	539.54
220.00	0.00085	7639200.00	9831766.88	7531570.39	28.70	-1.41	46387912.61	507.24
220.00	0.00085	8141900.00	10514243.9	8054378.15	29.14	-1.07	47118819.06	478.72
220.00	0.00085	8648400.00	11194650.6	8575599.94	29.44	-0.84	47847079.40	453.25
220.00	0.00084	9158600.00	11892252.9	9109994.30	29.85	-0.53	48593307.82	430.58
220.00	0.00084	9672600.00	12587772.3	9642793.05	30.14	-0.31	49336875.35	410.07
220.00	0.00084	10190000.0	13290944.8	10181454.4	30.43	-0.08	50088192.99	391.54
220.00	0.00084	10712000.0	14001871.9	10726056.2	30.71	0.13	50847362.54	374.68
220.00	0.00084	11237000.0	14720657.0	11276677.5	31.00	0.35	51614487.52	359.33
220.00	0.00084	11767000.0	15447404.9	11833398.7	31.28	0.56	52389673.22	345.23
220.00	0.00084	12300000.0	16171816.6	12388330.2	31.48	0.72	53161936.35	332.21
220.00	0.00084	12837000.0	16914696.6	12957409.4	31.77	0.94	53953449.21	320.30
220.00	0.00084	13378000.0	17655226.2	13524687.9	31.97	1.10	54742023.05	309.19
220.00	0.00084	13923000.0	18414674.2	14106458.8	32.26	1.32	55550299.91	298.98
220.00	0.00084	14472000.0	19171758.6	14686419.1	32.47	1.48	56355622.54	289.41
220.00	0.00084	15025000.0	19937228.8	15272803.4	32.69	1.65	57169427.58	280.50
220.00	0.00084	15582000.0	20711198.2	15865698.3	32.92	1.82	57991828.68	272.17
220.00	0.00084	16142000.0	21493782.1	16465192.3	33.15	2.00	58822941.45	264.41
220.00	0.00083	16707000.0	22285097.7	17071375.3	33.39	2.18	59662883.49	257.11

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 240 К**

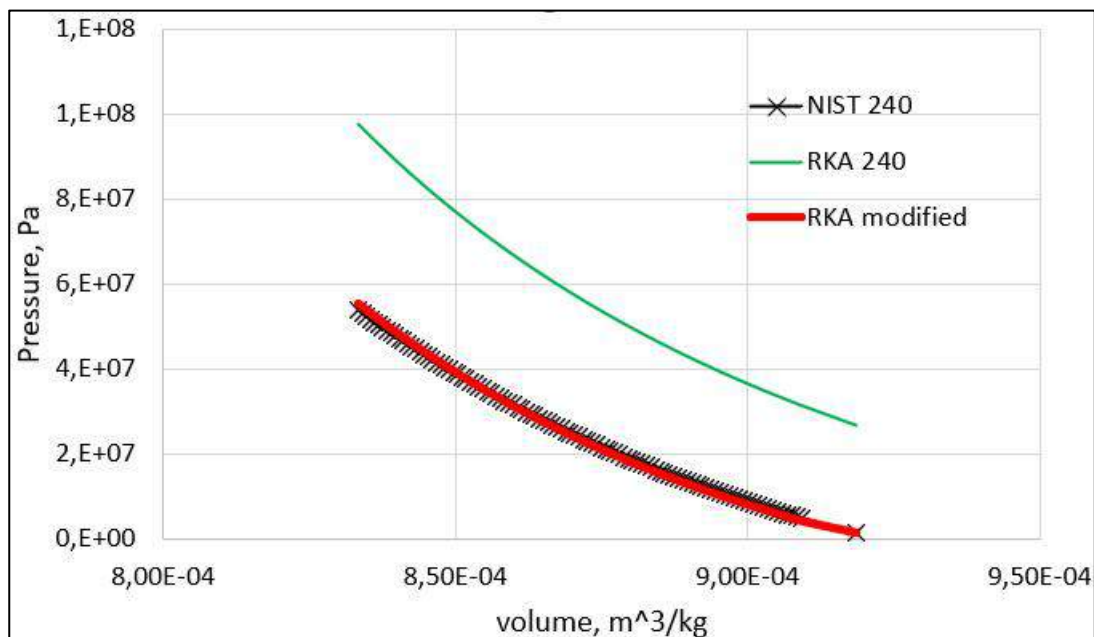


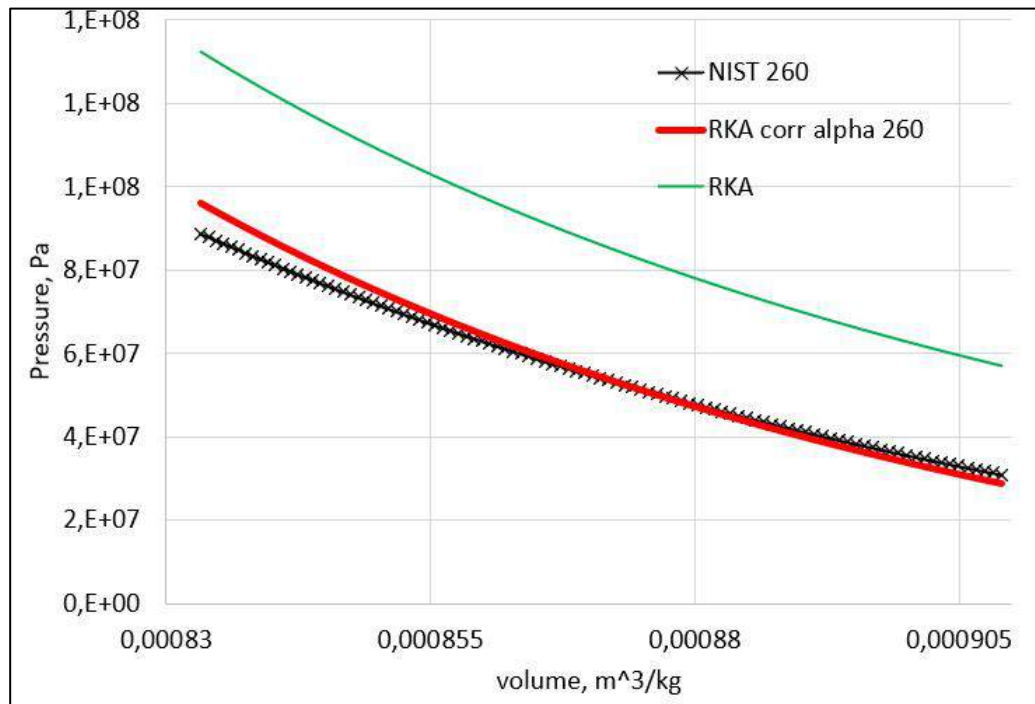
Рис. 2 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 240 К

		NIST	RKA_corr	RKA corr alpha		RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	P, Pa	Rel err, %	P, Pa	rel err %
240	9,18E-04	1,28E+06	1,28E+06	1,28E+06	0,00	2,66E+07	1970,78
240	9,09E-04	4,78E+06	1,69E-13	4,21E+03	-14,72	3,12E+07	527,45
240	9,08E-04	5,11E+06	1,58E-13	4,50E+03	-13,84	3,17E+07	488,98
240	9,07E-04	5,44E+06	1,48E-13	4,79E+03	-12,97	3,21E+07	455,12
240	9,07E-04	5,78E+06	1,39E-13	5,09E+03	-12,25	3,26E+07	425,78
240	9,06E-04	6,12E+06	1,32E-13	5,39E+03	-11,60	3,30E+07	399,81
240	9,05E-04	6,46E+06	1,25E-13	5,69E+03	-11,00	3,35E+07	376,67
240	9,04E-04	6,81E+06	1,18E-13	5,99E+03	-10,45	3,39E+07	355,91
240	9,03E-04	7,15E+06	1,13E-13	6,30E+03	-9,94	3,44E+07	337,19
240	9,03E-04	7,50E+06	1,07E-13	6,60E+03	-9,51	3,48E+07	320,41
240	9,02E-04	7,85E+06	1,03E-13	6,91E+03	-9,06	3,53E+07	304,94
240	9,01E-04	8,21E+06	9,81E-14	7,23E+03	-8,69	3,58E+07	290,95
240	9,00E-04	8,57E+06	9,40E-14	7,54E+03	-8,33	3,63E+07	278,10
240	8,99E-04	8,93E+06	9,02E-14	7,86E+03	-8,00	3,67E+07	266,25
240	8,98E-04	9,29E+06	8,67E-14	8,18E+03	-7,68	3,72E+07	255,29
240	8,98E-04	9,66E+06	8,34E-14	8,50E+03	-7,42	3,77E+07	245,25
240	8,97E-04	1,00E+07	8,03E-14	8,83E+03	-7,12	3,82E+07	235,78

240	8,96E-04	1,04E+07	7,74E-14	9,16E+03	-6,88	3,87E+07	227,06
240	8,95E-04	1,08E+07	7,47E-14	9,49E+03	-6,65	3,92E+07	218,90
240	8,94E-04	1,12E+07	7,22E-14	9,82E+03	-6,37	3,97E+07	211,16
240	8,94E-04	1,15E+07	6,98E-14	1,02E+04	-6,20	4,02E+07	204,07
240	8,93E-04	1,19E+07	6,76E-14	1,05E+04	-5,98	4,07E+07	197,31
240	8,92E-04	1,23E+07	6,54E-14	1,08E+04	-5,76	4,12E+07	190,94
240	8,91E-04	1,27E+07	6,34E-14	1,12E+04	-5,60	4,17E+07	184,99
240	8,90E-04	1,31E+07	6,15E-14	1,15E+04	-5,39	4,22E+07	179,29
240	8,90E-04	1,35E+07	5,97E-14	1,19E+04	-5,22	4,28E+07	173,96
240	8,89E-04	1,39E+07	5,80E-14	1,22E+04	-5,06	4,33E+07	168,90
240	8,88E-04	1,43E+07	5,64E-14	1,26E+04	-4,90	4,38E+07	164,08
240	8,87E-04	1,47E+07	5,48E-14	1,29E+04	-4,74	4,44E+07	159,51
240	8,87E-04	1,51E+07	5,33E-14	1,33E+04	-4,58	4,49E+07	155,14
240	8,86E-04	1,55E+07	5,19E-14	1,37E+04	-4,45	4,55E+07	151,03
240	8,85E-04	1,59E+07	5,06E-14	1,40E+04	-4,32	4,60E+07	147,10
240	8,84E-04	1,64E+07	4,93E-14	1,44E+04	-4,16	4,66E+07	143,30
240	8,83E-04	1,68E+07	4,80E-14	1,48E+04	-4,03	4,71E+07	139,70
240	8,83E-04	1,72E+07	4,68E-14	1,51E+04	-3,90	4,77E+07	136,26
240	8,82E-04	1,76E+07	4,57E-14	1,55E+04	-3,77	4,82E+07	132,96
240	8,81E-04	1,81E+07	4,46E-14	1,59E+04	-3,66	4,88E+07	129,82
240	8,80E-04	1,85E+07	4,36E-14	1,63E+04	-3,53	4,94E+07	126,78
240	8,80E-04	1,89E+07	4,26E-14	1,67E+04	-3,43	5,00E+07	123,88
240	8,79E-04	1,94E+07	4,16E-14	1,71E+04	-3,29	5,06E+07	121,06
240	8,78E-04	1,98E+07	4,07E-14	1,74E+04	-3,18	5,12E+07	118,38
240	8,77E-04	2,03E+07	3,98E-14	1,78E+04	-3,07	5,17E+07	115,79
240	8,76E-04	2,07E+07	3,89E-14	1,82E+04	-2,95	5,23E+07	113,29
240	8,76E-04	2,12E+07	3,81E-14	1,86E+04	-2,87	5,29E+07	110,92
240	8,75E-04	2,16E+07	3,73E-14	1,90E+04	-2,75	5,36E+07	108,59
240	8,74E-04	2,21E+07	3,65E-14	1,94E+04	-2,66	5,42E+07	106,37
240	8,73E-04	2,26E+07	3,57E-14	1,99E+04	-2,53	5,48E+07	104,20
240	8,73E-04	2,30E+07	3,50E-14	2,03E+04	-2,44	5,54E+07	102,12
240	8,72E-04	2,35E+07	3,43E-14	2,07E+04	-2,34	5,60E+07	100,11
240	8,71E-04	2,40E+07	3,36E-14	2,11E+04	-2,23	5,67E+07	98,16
240	8,70E-04	2,44E+07	3,30E-14	2,15E+04	-2,13	5,73E+07	96,27
240	8,70E-04	2,49E+07	3,23E-14	2,19E+04	-2,05	5,79E+07	94,46
240	8,69E-04	2,54E+07	3,17E-14	2,24E+04	-1,94	5,86E+07	92,68
240	8,68E-04	2,59E+07	3,11E-14	2,28E+04	-1,85	5,92E+07	90,97
240	8,67E-04	2,64E+07	3,05E-14	2,32E+04	-1,73	5,99E+07	89,30
240	8,67E-04	2,69E+07	3,00E-14	2,37E+04	-1,64	6,06E+07	87,69

240	8,66E-04	2,74E+07	2,94E-14	2,41E+04	-1,54	6,12E+07	86,12
240	8,65E-04	2,79E+07	2,89E-14	2,45E+04	-1,44	6,19E+07	84,60
240	8,64E-04	2,84E+07	2,84E-14	2,50E+04	-1,34	6,26E+07	83,12
240	8,64E-04	2,89E+07	2,79E-14	2,54E+04	-1,26	6,33E+07	81,70
240	8,63E-04	2,94E+07	2,74E-14	2,59E+04	-1,15	6,40E+07	80,30
240	8,62E-04	2,99E+07	2,69E-14	2,63E+04	-1,06	6,47E+07	78,95
240	8,61E-04	3,04E+07	2,65E-14	2,68E+04	-0,97	6,54E+07	77,63
240	8,61E-04	3,10E+07	2,60E-14	2,73E+04	-0,88	6,61E+07	76,35
240	8,60E-04	3,15E+07	2,56E-14	2,77E+04	-0,78	6,68E+07	75,10
240	8,59E-04	3,20E+07	2,52E-14	2,82E+04	-0,68	6,75E+07	73,88
240	8,58E-04	3,26E+07	2,48E-14	2,87E+04	-0,58	6,82E+07	72,69
240	8,58E-04	3,31E+07	2,43E-14	2,91E+04	-0,47	6,90E+07	71,53
240	8,57E-04	3,36E+07	2,40E-14	2,96E+04	-0,38	6,97E+07	70,41
240	8,56E-04	3,42E+07	2,36E-14	3,01E+04	-0,27	7,05E+07	69,30
240	8,55E-04	3,47E+07	2,32E-14	3,06E+04	-0,18	7,12E+07	68,23
240	8,55E-04	3,53E+07	2,28E-14	3,11E+04	-0,08	7,20E+07	67,19
240	8,54E-04	3,58E+07	2,25E-14	3,15E+04	0,02	7,27E+07	66,17
240	8,53E-04	3,64E+07	2,21E-14	3,20E+04	0,12	7,35E+07	65,17
240	8,53E-04	3,70E+07	2,18E-14	3,25E+04	0,23	7,43E+07	64,19
240	8,52E-04	3,75E+07	2,15E-14	3,30E+04	0,32	7,50E+07	63,25
240	8,51E-04	3,81E+07	2,11E-14	3,35E+04	0,43	7,58E+07	62,31
240	8,50E-04	3,87E+07	2,08E-14	3,40E+04	0,52	7,66E+07	61,41

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 260 К**



**Рис. 3 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 260 К**

		NIST	RKA_corr	RKA corr alpha		RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	P, Pa	Rel err, %	P, Pa	rel err %
260	9,09E-04	3,10E+07	3,08E+07	2,89E+07	-6,68	5,69E+07	85,03
260	9,08E-04	3,14E+07	3,12E+07	2,94E+07	-6,50	5,74E+07	83,87
260	9,07E-04	3,18E+07	3,17E+07	2,98E+07	-6,29	5,79E+07	82,73
260	9,07E-04	3,22E+07	3,22E+07	3,02E+07	-6,11	5,85E+07	81,61
260	9,06E-04	3,26E+07	3,27E+07	3,07E+07	-5,92	5,90E+07	80,52
260	9,05E-04	3,31E+07	3,32E+07	3,12E+07	-5,73	5,95E+07	79,46
260	9,04E-04	3,35E+07	3,37E+07	3,16E+07	-5,55	6,00E+07	78,41
260	9,03E-04	3,39E+07	3,41E+07	3,21E+07	-5,36	6,06E+07	77,38
260	9,03E-04	3,43E+07	3,46E+07	3,26E+07	-5,19	6,11E+07	76,38
260	9,02E-04	3,48E+07	3,51E+07	3,30E+07	-5,00	6,16E+07	75,39
260	9,01E-04	3,52E+07	3,57E+07	3,35E+07	-4,83	6,22E+07	74,43
260	9,00E-04	3,56E+07	3,62E+07	3,40E+07	-4,66	6,27E+07	73,48
260	8,99E-04	3,61E+07	3,67E+07	3,45E+07	-4,49	6,33E+07	72,56
260	8,98E-04	3,65E+07	3,72E+07	3,50E+07	-4,31	6,38E+07	71,64
260	8,98E-04	3,70E+07	3,77E+07	3,54E+07	-4,16	6,44E+07	70,76
260	8,97E-04	3,74E+07	3,82E+07	3,59E+07	-3,99	6,50E+07	69,88

260	8,96E-04	3,79E+07	3,88E+07	3,64E+07	-3,83	6,55E+07	69,03
260	8,95E-04	3,83E+07	3,93E+07	3,69E+07	-3,67	6,61E+07	68,19
260	8,94E-04	3,88E+07	3,98E+07	3,74E+07	-3,49	6,67E+07	67,35
260	8,94E-04	3,93E+07	4,04E+07	3,79E+07	-3,35	6,73E+07	66,55
260	8,93E-04	3,97E+07	4,09E+07	3,85E+07	-3,19	6,78E+07	65,75
260	8,92E-04	4,02E+07	4,15E+07	3,90E+07	-3,02	6,84E+07	64,96
260	8,91E-04	4,07E+07	4,20E+07	3,95E+07	-2,88	6,90E+07	64,20
260	8,90E-04	4,11E+07	4,26E+07	4,00E+07	-2,71	6,96E+07	63,44
260	8,90E-04	4,16E+07	4,32E+07	4,06E+07	-2,57	7,02E+07	62,70
260	8,89E-04	4,21E+07	4,37E+07	4,11E+07	-2,41	7,08E+07	61,97
260	8,88E-04	4,26E+07	4,43E+07	4,16E+07	-2,26	7,14E+07	61,26
260	8,87E-04	4,31E+07	4,49E+07	4,22E+07	-2,11	7,21E+07	60,55
260	8,87E-04	4,36E+07	4,55E+07	4,27E+07	-1,96	7,27E+07	59,86
260	8,86E-04	4,41E+07	4,60E+07	4,33E+07	-1,82	7,33E+07	59,18
260	8,85E-04	4,46E+07	4,66E+07	4,38E+07	-1,68	7,39E+07	58,51
260	8,84E-04	4,51E+07	4,72E+07	4,44E+07	-1,52	7,46E+07	57,85
260	8,83E-04	4,56E+07	4,78E+07	4,50E+07	-1,37	7,52E+07	57,20
260	8,83E-04	4,61E+07	4,84E+07	4,55E+07	-1,23	7,58E+07	56,57
260	8,82E-04	4,66E+07	4,91E+07	4,61E+07	-1,08	7,65E+07	55,94
260	8,81E-04	4,71E+07	4,97E+07	4,67E+07	-0,95	7,71E+07	55,33
260	8,80E-04	4,76E+07	5,03E+07	4,73E+07	-0,80	7,78E+07	54,72
260	8,80E-04	4,82E+07	5,09E+07	4,78E+07	-0,67	7,85E+07	54,13
260	8,79E-04	4,87E+07	5,15E+07	4,84E+07	-0,51	7,91E+07	53,53
260	8,78E-04	4,92E+07	5,22E+07	4,90E+07	-0,38	7,98E+07	52,96
260	8,77E-04	4,97E+07	5,28E+07	4,96E+07	-0,24	8,05E+07	52,39
260	8,76E-04	5,03E+07	5,35E+07	5,02E+07	-0,09	8,12E+07	51,83
260	8,76E-04	5,08E+07	5,41E+07	5,08E+07	0,03	8,18E+07	51,28
260	8,75E-04	5,14E+07	5,48E+07	5,15E+07	0,18	8,25E+07	50,73
260	8,74E-04	5,19E+07	5,54E+07	5,21E+07	0,31	8,32E+07	50,20
260	8,73E-04	5,25E+07	5,61E+07	5,27E+07	0,46	8,39E+07	49,67
260	8,73E-04	5,30E+07	5,68E+07	5,33E+07	0,59	8,47E+07	49,15
260	8,72E-04	5,36E+07	5,74E+07	5,40E+07	0,73	8,54E+07	48,64
260	8,71E-04	5,41E+07	5,81E+07	5,46E+07	0,87	8,61E+07	48,13
260	8,70E-04	5,47E+07	5,88E+07	5,53E+07	1,01	8,68E+07	47,64
260	8,70E-04	5,53E+07	5,95E+07	5,59E+07	1,14	8,75E+07	47,15
260	8,69E-04	5,58E+07	6,02E+07	5,66E+07	1,28	8,83E+07	46,66
260	8,68E-04	5,64E+07	6,09E+07	5,72E+07	1,42	8,90E+07	46,19
260	8,67E-04	5,70E+07	6,16E+07	5,79E+07	1,56	8,98E+07	45,72
260	8,67E-04	5,76E+07	6,23E+07	5,86E+07	1,70	9,05E+07	45,25
260	8,66E-04	5,82E+07	6,30E+07	5,92E+07	1,84	9,13E+07	44,80

260	8,65E-04	5,88E+07	6,38E+07	5,99E+07	1,97	9,20E+07	44,35
260	8,64E-04	5,94E+07	6,45E+07	6,06E+07	2,12	9,28E+07	43,90
260	8,64E-04	6,00E+07	6,52E+07	6,13E+07	2,24	9,36E+07	43,47
260	8,63E-04	6,06E+07	6,60E+07	6,20E+07	2,39	9,44E+07	43,03
260	8,62E-04	6,12E+07	6,67E+07	6,27E+07	2,52	9,52E+07	42,61
260	8,61E-04	6,18E+07	6,75E+07	6,34E+07	2,66	9,59E+07	42,19
260	8,61E-04	6,24E+07	6,82E+07	6,41E+07	2,79	9,67E+07	41,77
260	8,60E-04	6,30E+07	6,90E+07	6,48E+07	2,93	9,76E+07	41,37
260	8,59E-04	6,36E+07	6,98E+07	6,56E+07	3,08	9,84E+07	40,96
260	8,58E-04	6,42E+07	7,06E+07	6,63E+07	3,22	9,92E+07	40,56
260	8,58E-04	6,49E+07	7,14E+07	6,71E+07	3,36	1,00E+08	40,16
260	8,57E-04	6,55E+07	7,21E+07	6,78E+07	3,50	1,01E+08	39,78
260	8,56E-04	6,61E+07	7,30E+07	6,86E+07	3,65	1,02E+08	39,39
260	8,55E-04	6,68E+07	7,38E+07	6,93E+07	3,79	1,03E+08	39,01
260	8,55E-04	6,74E+07	7,46E+07	7,01E+07	3,92	1,03E+08	38,64
260	8,54E-04	6,81E+07	7,54E+07	7,08E+07	4,07	1,04E+08	38,27
260	8,53E-04	6,87E+07	7,62E+07	7,16E+07	4,21	1,05E+08	37,91
260	8,53E-04	6,94E+07	7,71E+07	7,24E+07	4,36	1,06E+08	37,54
260	8,52E-04	7,00E+07	7,79E+07	7,32E+07	4,49	1,07E+08	37,19
260	8,51E-04	7,07E+07	7,87E+07	7,40E+07	4,64	1,08E+08	36,84
260	8,50E-04	7,14E+07	7,96E+07	7,48E+07	4,78	1,09E+08	36,49
260	8,50E-04	7,21E+07	8,05E+07	7,56E+07	4,93	1,10E+08	36,15
260	8,49E-04	7,27E+07	8,13E+07	7,64E+07	5,07	1,10E+08	35,81
260	8,48E-04	7,34E+07	8,22E+07	7,72E+07	5,22	1,11E+08	35,48
260	8,47E-04	7,41E+07	8,31E+07	7,81E+07	5,37	1,12E+08	35,15
260	8,47E-04	7,48E+07	8,40E+07	7,89E+07	5,52	1,13E+08	34,82
260	8,46E-04	7,55E+07	8,49E+07	7,98E+07	5,67	1,14E+08	34,49
260	8,45E-04	7,62E+07	8,58E+07	8,06E+07	5,81	1,15E+08	34,18
260	8,45E-04	7,69E+07	8,67E+07	8,15E+07	5,97	1,16E+08	33,86
260	8,44E-04	7,76E+07	8,76E+07	8,23E+07	6,12	1,17E+08	33,55
260	8,43E-04	7,83E+07	8,85E+07	8,32E+07	6,27	1,18E+08	33,24
260	8,42E-04	7,90E+07	8,95E+07	8,41E+07	6,42	1,19E+08	32,94
260	8,42E-04	7,97E+07	9,04E+07	8,50E+07	6,58	1,20E+08	32,63
260	8,41E-04	8,04E+07	9,14E+07	8,59E+07	6,74	1,21E+08	32,34
260	8,40E-04	8,12E+07	9,23E+07	8,68E+07	6,88	1,22E+08	32,04
260	8,40E-04	8,19E+07	9,33E+07	8,77E+07	7,04	1,23E+08	31,75
260	8,39E-04	8,26E+07	9,43E+07	8,86E+07	7,20	1,24E+08	31,47
260	8,38E-04	8,34E+07	9,53E+07	8,95E+07	7,36	1,25E+08	31,18
260	8,38E-04	8,41E+07	9,63E+07	9,04E+07	7,52	1,26E+08	30,90
260	8,37E-04	8,49E+07	9,73E+07	9,14E+07	7,68	1,27E+08	30,62

260	8,36E-04	8,56E+07	9,83E+07	9,23E+07	7,84	1,28E+08	30,34
260	8,35E-04	8,64E+07	9,93E+07	9,33E+07	8,01	1,29E+08	30,07
260	8,35E-04	8,71E+07	1,00E+08	9,43E+07	8,18	1,30E+08	29,80
260	8,34E-04	8,79E+07	1,01E+08	9,52E+07	8,33	1,31E+08	29,54
260	8,33E-04	8,87E+07	1,02E+08	9,62E+07	8,50	1,32E+08	29,27

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 280 К**

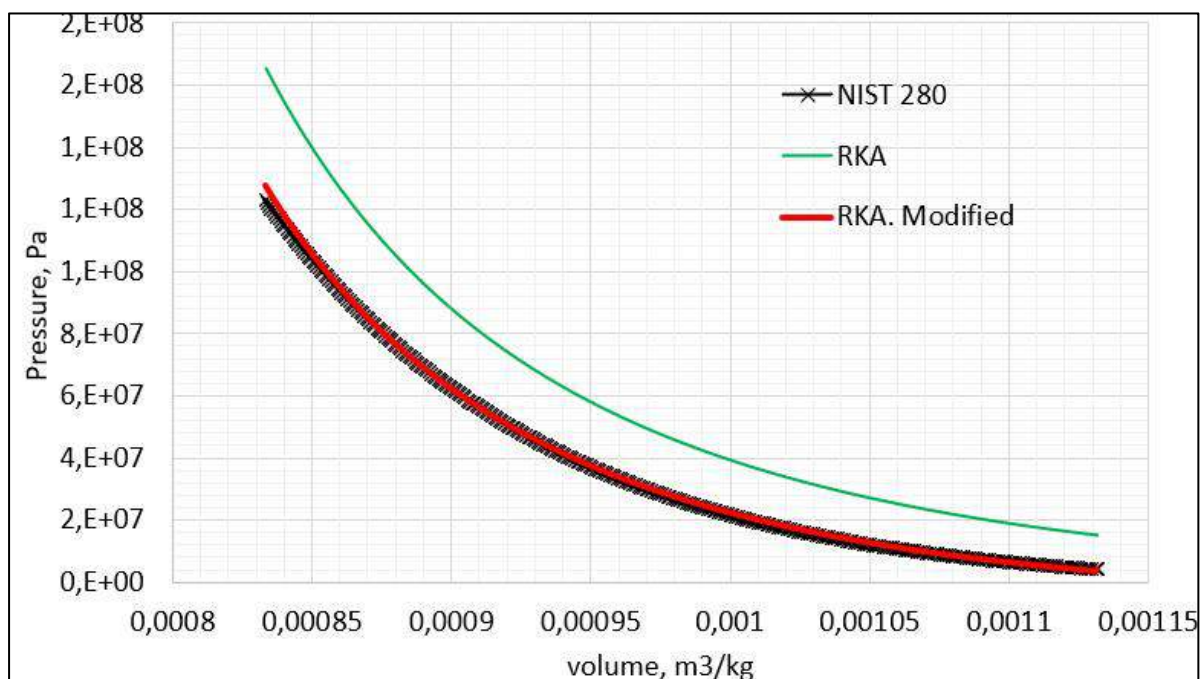


Рис. 4 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 280 К

		NIST	RKA_corr	RKA_corr alpha		RKA	
T, K	v, m³/kg	P, Pa	P, Pa	P, Pa	Rel err %	P, Pa	rel err %
280	0.0011312	4192500	4126468.393	4160700	0.00	15266583.76	269.97
280	0.0011299	4269300	4245699.855	3573626.457	-14.76	15406665.18	262.88
280	0.0011287	4347200	4356885.264	3676883.932	-13.88	15537149.62	256.61
280	0.0011274	4426200	4478568.306	3773173.32	-13.20	15679797.49	250.11
280	0.0011261	4506100	4601546.278	3878553.926	-12.37	15823800.36	243.88
280	0.0011249	4587200	4716225.845	3985055.974	-11.56	15957941.05	238.36
280	0.0011236	4669300	4841733.527	4084371.392	-10.96	16104589.81	232.62
280	0.0011223	4752500	4968577.516	4193064.233	-10.20	16252635.64	227.11
280	0.0011211	4836700	5086862.891	4302914.35	-9.46	16390546.08	222.21
280	0.0011099	5644000	6248519.642	4959907.822	-5.96	17737910.68	183.87

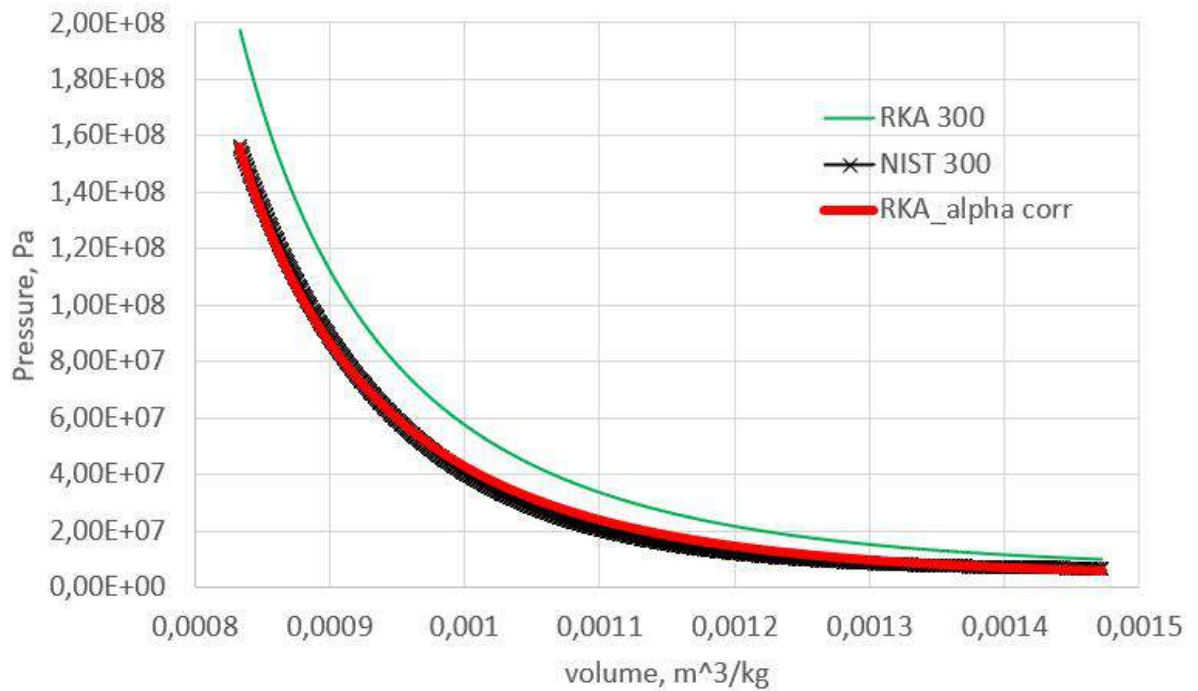
280	0.0011086	5739300	6390365.123	5068807.223	-5.52	17901612.93	180.13
280	0.0011074	5835700	6522644.123	5187991.675	-4.93	18054123.83	176.79
280	0.0011062	5933200	6656227.626	5299136.774	-4.52	18207993.58	173.55
280	0.0011013	6334800	7215516.486	5411376.747	-4.12	18850686.32	161.25
280	0.0011001	6438100	7355941.473	5534218.537	-3.57	19011676.96	158.45
280	0.0010989	6542600	7497754.884	5648775.511	-3.20	19174111.62	155.73
280	0.0010977	6648200	7640971.115	5764462.218	-2.84	19338004.87	153.08
280	0.0010965	6755000	7785604.738	5881290.241	-2.50	19503371.51	150.51
280	0.0010953	6863100	7931670.505	5999271.305	-2.16	19670226.49	148.00
280	0.0010941	6972300	8079183.349	6128399.066	-1.67	19838584.94	145.55
280	0.0010929	7082700	8228158.386	6248820.578	-1.36	20008462.19	143.17
280	0.0010917	7194300	8378610.919	6370432.185	-1.05	20179873.76	140.85
280	0.0010905	7307100	8530556.444	6493246.201	-0.75	20352835.35	138.59
280	0.0010846	7889800	9299870.186	7125794.189	0.61	21226314.65	128.24
280	0.0010834	8010000	9460976.848	7256089.905	0.86	21408779.14	126.29
280	0.0010823	8131500	9610067.997	7387678.589	1.10	21577499.68	124.53
280	0.0010811	8254300	9774267.037	7520573.826	1.34	21763168.87	122.66
280	0.0010799	8378300	9940104.62	7654789.368	1.57	21950535.53	120.83
280	0.0010695	9553000	11448674.19	7778992.024	1.65	23648191.68	106.56
280	0.0010684	9690100	11616000.53	7915777.224	1.87	23835783.32	105.20
280	0.0010672	9828600	11800298.13	8053923.834	2.08	24042247.27	103.74
280	0.0010661	9968400	11970867.37	8193446.295	2.29	24233189.72	102.43
280	0.001065	10110000	12143011.63	8322563.018	2.35	24425759.07	101.15
280	0.0010638	10252000	12332620.28	8464763.558	2.55	24637709.03	99.78
280	0.0010526	11754000	14197495.38	8608383.117	2.75	26714133.91	88.16
280	0.0010515	11912000	14390319.32	8753436.866	2.94	26928034.57	87.13
280	0.0010504	12072000	14584944.79	8887675.815	2.98	27143791.10	86.11
280	0.0010493	12233000	14781390.4	9035521.535	3.17	27361422.29	85.11
280	0.0010482	12395000	14979674.97	9172346.13	3.21	27580947.15	84.12
280	0.0010471	12559000	15179817.57	9323041.648	3.38	27802384.94	83.15
280	0.001046	12725000	15381837.49	9462505.551	3.42	28025755.17	82.20
280	0.0010449	12891000	15585754.3	9616110.125	3.59	28251077.56	81.26
280	0.0010438	13060000	15791587.77	9758268.326	3.62	28478372.11	80.34
280	0.0010428	13230000	15980389.18	9914842.69	3.79	28686731.91	79.51
280	0.0010417	13401000	16189937.6	10059751.55	3.81	28917847.88	78.62
280	0.0010406	13574000	16401461.69	10219357.95	3.98	29150995.58	77.73
280	0.0010395	13749000	16614982.24	10367075.25	4.00	29386196.00	76.87
280	0.0010384	13925000	16830520.29	10516156.55	4.02	29623470.38	76.01
280	0.0010373	14102000	17048097.17	10680362.46	4.18	29862840.25	75.17

280	0.0010363	14281000	17247681.74	10832340.27	4.20	30082285.95	74.41
280	0.0010352	14462000	17469211.12	10985725.01	4.22	30325717.03	73.60
280	0.0010204	17161000	20663619.26	11154675.12	4.37	33820452.16	63.67
280	0.0010132	18633000	22372941.67	11311047.77	4.38	35679778.93	59.48
280	0.0010121	18850000	22643742.01	11468871.88	4.40	35973727.05	58.87
280	0.0010111	19069000	22892214.63	11628162.22	4.42	36243296.67	58.32
280	0.0010101	19290000	23142891.61	11788933.72	4.43	36515121.81	57.78
280	0.0010091	19512000	23395795.42	11951201.53	4.44	36789225.14	57.25
280	0.0010081	19737000	23650948.82	12129945.5	4.59	37065629.56	56.72
280	0.001007	19963000	23934243.35	12295391.67	4.61	37372359.91	56.15
280	0.001006	20191000	24194196.24	12462382.1	4.62	37653672.55	55.63
280	0.001005	20421000	24456471.09	12630932.7	4.63	37937359.20	55.12
280	0.001004	20652000	24721091.87	12801059.59	4.64	38223443.99	54.62
280	0.001003	20886000	24988082.82	12972779.07	4.66	38511951.34	54.12
280	0.001002	21121000	25257468.51	13146107.64	4.67	38802905.99	53.63
280	0.001001	21358000	25529273.82	13321062.03	4.68	39096332.99	53.14
280	0.001	21597000	25803523.93	13497659.16	4.71	39392257.71	52.66
280	0.000999	21838000	26080244.36	13675916.17	4.72	39690705.84	52.19
280	0.000998	22081000	26359460.96	13839423	4.61	39991703.40	51.72
280	0.00099701	22326000	26638369.94	14020897.25	4.63	40292228.17	51.26
280	0.00099602	22572000	26919776.78	14204082.48	4.64	40595303.36	50.80
280	0.00099502	22821000	27206588.5	14388996.7	4.65	40904055.83	50.35
280	0.00099404	23071000	27490188.62	14575658.13	4.67	41209210.25	49.91
280	0.00099305	23324000	27779246.72	14764085.24	4.69	41520095.40	49.46
280	0.00098814	24615000	29251883.15	15697313.01	4.55	43101775.66	47.35
280	0.00098717	24879000	29550684.18	15896391.8	4.57	43422275.79	46.94
280	0.00098619	25145000	29855268.45	16079019.06	4.48	43748835.81	46.54
280	0.00098522	25414000	30159448.05	16281739.11	4.51	44074819.50	46.14
280	0.00098425	25684000	30466345.44	16486396.41	4.54	44403573.46	45.75
280	0.00098328	25956000	30775989.2	16674147.18	4.44	44735126.46	45.36
280	0.00098232	26231000	31085173.22	16882561.2	4.47	45066045.86	44.98
280	0.00098135	26507000	31400367.92	17073762.48	4.38	45403255.08	44.59
280	0.00098039	26785000	31715103.5	17286011.4	4.42	45739830.58	44.22
280	0.00097561	28209000	33324569.95	17480735.17	4.33	47458822.88	42.41
280	0.00097466	28500000	33653052.43	17677162.14	4.25	47809229.22	42.07
280	0.00097371	28793000	33984460.41	17895219.22	4.28	48162613.24	41.72
280	0.00096525	31531000	37069860.89	19825239.42	3.97	51446044.73	38.78
280	0.00096432	31846000	37424329.39	20042332.05	3.90	51822541.08	38.47
280	0.00095969	33457000	39236576.18	20261353.17	3.84	53745227.58	36.98

280	0.00095877	33786000	39606340.12	20482322.5	3.78	54137091.06	36.69
280	0.00095785	34117000	39979387.96	20727662.76	3.83	54532290.11	36.40
280	0.00095329	35809000	41878103.53	20952788.56	3.77	56541567.15	35.01
280	0.00095238	36155000	42267162.27	21179925.25	3.72	56952843.90	34.74
280	0.00095147	36503000	42659682.6	21409093.57	3.67	57367633.95	34.48
280	0.00095057	36853000	43051330.87	21640314.51	3.61	57781358.20	34.22
280	0.00094967	37206000	43446438.21	21873609.37	3.56	58198592.42	33.95
280	0.00094877	37562000	43845041.74	22108999.67	3.52	58619373.86	33.70
280	0.00094429	39376000	45882536.66	22346507.23	3.47	60768030.47	32.44
280	0.0009434	39746000	46298150.97	22586154.16	3.43	61205881.03	32.20
280	0.00094251	40119000	46717450.96	22827962.82	3.38	61647468.30	31.96
280	0.00094162	40494000	47140476.59	23069505.08	3.33	62092832.39	31.72
280	0.00094073	40872000	47567268.34	23313210.56	3.28	62542013.94	31.48
280	0.00093985	41253000	47993007.78	23561596.79	3.25	62989942.24	31.25
280	0.00093897	41636000	48422509.54	23807201.7	3.19	63441683.36	31.02
280	0.00093809	42021000	48855814.38	24057533.36	3.14	63897278.23	30.79
280	0.00093371	43989000	51070511.8	24310120.24	3.11	66223678.27	29.67
280	0.00093284	44391000	51522215.02	24562400.21	3.06	66697720.58	29.45
280	0.00093197	44795000	51977928.52	24816936.67	3.00	67175823.76	29.24
280	0.0009311	45202000	52437696.22	25073753.26	2.96	67658031.90	29.03
280	0.00093023	45612000	52901562.65	25332873.92	2.92	68144389.69	28.81
280	0.00092937	46024000	53364169.81	25591643.2	2.86	68629279.90	28.61
280	0.00091158	55337000	63922332.41	28577957.07	2.36	79659848.17	24.62
280	0.00091075	55812000	64465046.27	28859924.15	2.31	80225148.61	24.45
280	0.00090992	56291000	65012621.85	29144398.32	2.26	80795360.61	24.28
280	0.00090909	56773000	65565113.92	29431406.05	2.22	81370539.10	24.11
280	0.00090827	57258000	66115831.8	29720974.18	2.17	81943719.32	23.94
280	0.00090744	57745000	66678263.45	30010040.97	2.12	82528937.23	23.77
280	0.00090662	58236000	67238912	30304784.07	2.08	83112147.04	23.61
280	0.0009058	58730000	67804579.61	30599025.63	2.04	83700425.31	23.44
280	0.00090498	59228000	68375323.01	30895881.9	1.99	84293828.91	23.28
280	0.00090416	59728000	68951199.76	31195380.64	1.95	84892415.54	23.12
280	0.00090334	60231000	69532268.23	31494321.2	1.90	85496243.72	22.96
280	0.00089847	63319000	73093514.4	31799160.66	1.86	89193695.40	22.03
280	0.00089767	63845000	73697128.26	32103441.24	1.82	89819854.65	21.88
280	0.00089686	64374000	74313800.38	32410419.98	1.77	90459403.47	21.73
280	0.00089606	64906000	74928366.68	32720125.54	1.73	91096613.05	21.58
280	0.00089526	65442000	75548469.06	33032586.99	1.69	91739407.58	21.43
280	0.00089445	65981000	76182028.07	33344429.11	1.64	92395992.32	21.28

280	0.00089366	66523000	76805537.25	33662460.65	1.61	93042007.22	21.14
280	0.00088889	69847000	80691300.2	33979871.73	1.56	97064685.52	20.29
280	0.0008881	70413000	81355524.67	34300096.7	1.52	97751757.01	20.15
280	0.00088731	70982000	82025806.87	34623165.6	1.48	98444935.30	20.02
280	0.00088652	71555000	82702217.7	34945550.46	1.44	99144291.43	19.88
280	0.00088574	72131000	83376149.43	35274367.24	1.40	99840926.44	19.75
280	0.00088496	72711000	84056196.09	35602498.29	1.36	100543724.63	19.61
280	0.00088417	73294000	84751267.37	35933532.69	1.32	101261888.44	19.48
280	0.00088339	73881000	85443839.72	36267501.52	1.28	101977309.87	19.35
280	0.00088261	74471000	86142745.23	36604436.27	1.24	102699113.13	19.22
280	0.00088183	75065000	86848058.55	36944368.85	1.21	103427373.01	19.09
280	0.00087719	78703000	91180432.89	37283546.2	1.17	107897266.80	18.33
280	0.00087642	79322000	91922743.72	37625719.19	1.13	108662568.47	18.21
280	0.00087184	83113000	96482699.69	39735442.34	0.91	113360286.04	17.49
280	0.00087108	83758000	97264106.04	40095374.89	0.88	114164721.11	17.38
280	0.00087032	84406000	98052779.94	40458499.33	0.85	114976472.13	17.26
280	0.0008658	88378000	102898371.1	40824850.27	0.82	119960318.83	16.58
280	0.00086505	89053000	103728917.4	41194462.77	0.79	120813973.88	16.47
280	0.0008643	89733000	104567260.1	41563163.94	0.75	121675473.52	16.36
280	0.00086356	90416000	105402159.6	41935123.38	0.72	122533268.56	16.25
280	0.00086281	91103000	106256276.9	42310376.38	0.69	123410639.09	16.14
280	0.00086207	91794000	107106931.9	42688958.73	0.66	124284284.79	16.04
280	0.0008569	96744000	113277930.7	43070906.71	0.63	130617240.29	15.31
280	0.00085616	97467000	114195059.2	43456257.09	0.61	131557742.50	15.20
280	0.00085543	98194000	115108414.1	43840609.62	0.57	132494202.82	15.10
280	0.0008547	98926000	116030437.9	44228360.61	0.54	133439379.37	15.00
280	0.00085397	99661000	116961239.2	44619547.07	0.51	134393380.98	14.90
280	0.00084746	106470000	125668482.5	48271833.53	0.30	143309643.14	14.04
280	0.00084674	107250000	126678524	48694326.05	0.28	144343038.88	13.94
280	0.00084602	108030000	127698376.8	49115626.05	0.26	145386293.56	13.85
280	0.00084531	108810000	128713796.6	49540665.34	0.24	146424836.93	13.76
280	0.00084459	109600000	129753514.1	49969485.21	0.22	147488051.38	13.67
280	0.00084034	114440000	136102985.3	50402127.54	0.20	153977203.35	13.13
280	0.00083963	115260000	137200349.8	50838634.78	0.19	155098068.03	13.04
280	0.00083893	116090000	138292885.1	51273845.74	0.16	156213819.04	12.96
280	0.00083822	116920000	139411948.4	51718165.8	0.15	157356477.30	12.87
280	0.00083752	117750000	140526159	52161183.54	0.13	158493997.34	12.79

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 300 К**



**Рис. 5 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 300 К**

		NIST	RKA_corr	RKA_corr alpha		RKA	
T, K	v, m3/kg	P, Pa	P, Pa	P, Pa	Rel err, %	P, Pa	rel err %
300	0.0014706	6719000	6851193.602	5499049.589	-18.08	9673010.04	43.97
300	0.0014684	6727100	6885281.59	5612169.246	-16.47	9714226.35	44.40
300	0.0014663	6735300	6918253.498	5640092.49	-16.16	9754028.08	44.82
300	0.0014641	6743700	6953255.121	5667101.497	-15.86	9796211.63	45.26
300	0.001462	6752400	6987109.836	5695773.147	-15.54	9836947.61	45.68
300	0.0014599	6761200	7021403.59	5723505.307	-15.24	9878147.93	46.10
300	0.0014577	6770300	7057807.025	5751597.106	-14.93	9921814.10	46.55
300	0.0014556	6779500	7093016.298	5781417.053	-14.61	9963982.15	46.97
300	0.0014535	6789000	7128680.904	5810258.801	-14.30	10006631.23	47.39
300	0.0014514	6798700	7164806.335	5839473.537	-13.99	10049766.96	47.82
300	0.0014493	6808600	7201398.151	5869065.757	-13.67	10093395.03	48.24
300	0.0014472	6818800	7238461.99	5899040.018	-13.36	10137521.19	48.67
300	0.0014451	6829100	7276003.561	5929400.937	-13.04	10182151.30	49.10
300	0.001443	6839700	7314028.65	5960153.192	-12.72	10227291.28	49.53
300	0.0014409	6850600	7352543.122	5991301.522	-12.40	10272947.11	49.96

300	0.0014388	6861600	7391552.918	6022850.73	-12.08	10319124.87	50.39
300	0.0014368	6872900	7429171.116	6054805.684	-11.76	10363594.56	50.79
300	0.0014347	6884400	7469165.397	6085620.708	-11.45	10410809.14	51.22
300	0.0014327	6896200	7507732.343	6118382.105	-11.13	10456277.67	51.62
300	0.0014306	6908200	7548734.662	6149974.297	-10.82	10504553.14	52.06
300	0.0014286	6920400	7588273.081	6183561.431	-10.49	10551043.72	52.46
300	0.0014265	6932900	7630307.613	6215949.407	-10.18	10600404.79	52.90
300	0.0014245	6945700	7670840.831	6250382.081	-9.84	10647941.25	53.30
300	0.0014225	6958700	7711867.966	6283584.949	-9.53	10695996.74	53.71
300	0.0014205	6971900	7753394.791	6317192.411	-9.22	10744577.14	54.11
300	0.0013928	7185800	8383240.154	6601197.806	-6.66	11474776.37	59.69
300	0.0013908	7203200	8432918.415	6638666.858	-6.33	11531897.61	60.09
300	0.0013793	7314200	8730472.349	6676590.636	-6.01	11872781.74	62.33
300	0.0013774	7333700	8781646.191	6713044.314	-5.70	11931203.03	62.69
300	0.0013755	7353700	8833408.385	6751870.346	-5.38	11990238.09	63.05
300	0.0013736	7373900	8885765.665	6791167.179	-5.04	12049893.79	63.41
300	0.0013717	7394500	8938724.854	6828940.344	-4.74	12110177.06	63.77
300	0.0013699	7415300	8989458.2	6867148.311	-4.43	12167872.80	64.09
300	0.001368	7436600	9043609.435	6907842.36	-4.10	12229398.46	64.45
300	0.0013661	7458100	9098383.201	6946958.289	-3.80	12291572.69	64.81
300	0.0013643	7480000	9150854.884	6986524.228	-3.49	12351079.45	65.12
300	0.0013624	7502300	9206861.622	7028664.361	-3.15	12414537.70	65.48
300	0.0013605	7524900	9263512.309	7069170.083	-2.84	12478666.29	65.83
300	0.0013587	7547900	9317782.137	7110141.616	-2.53	12540044.91	66.14
300	0.0013569	7571200	9372643.02	7151584.273	-2.22	12602038.51	66.45
300	0.001355	7594800	9431200.135	7193503.431	-1.91	12668150.67	66.80
300	0.0013532	7618900	9487296.462	7235904.538	-1.60	12731429.21	67.10
300	0.0013514	7643200	9544003.953	7278793.111	-1.29	12795343.16	67.41
300	0.0013495	7668000	9604532.356	7322174.738	-0.98	12863504.82	67.76
300	0.0013477	7693100	9662517.415	7363733.062	-0.70	12928746.54	68.06
300	0.0013459	7718600	9721134.521	7408091.158	-0.38	12994644.89	68.35
300	0.0013441	7744500	9780390.684	7452959.199	-0.07	13061207.00	68.65
300	0.0013423	7770800	9840293	7495941.486	0.21	13128440.09	68.95
300	0.0013405	7797400	9900848.656	7541819.52	0.53	13196351.44	69.24
300	0.0013387	7824500	9962064.927	7588225.046	0.84	13264948.45	69.53
300	0.0013369	7851900	10023949.18	7632680.286	1.12	13334238.61	69.82
300	0.0013175	8180500	10735401.43	7677619.691	1.41	14127138.68	72.69
300	0.0013158	8212900	10801813.1	7725586.871	1.72	14200832.40	72.91
300	0.0013141	8245700	10868911.89	7771538.292	2.00	14275237.04	73.12

300	0.0013123	8279000	10940714.84	7817990.35	2.29	14354801.65	73.39
300	0.0013106	8312800	11009251.68	7867572.315	2.60	14430693.68	73.60
300	0.0013089	8347000	11078498.53	7915070.894	2.89	14507319.85	73.80
300	0.0013072	8381600	11148463.08	7963087.216	3.17	14584687.95	74.01
300	0.0013055	8416700	11219153.07	8011627.023	3.45	14662805.84	74.21
300	0.0013038	8452300	11290576.39	8060696.129	3.73	14741681.50	74.41
300	0.0012755	9131600	12594913.9	8683670.384	6.98	16173771.83	77.12
300	0.0012739	9176200	12675613.3	8736931.553	7.22	16261907.99	77.22
300	0.0012723	9221400	12757108.9	8793926.026	7.50	16350863.88	77.31
300	0.0012706	9267100	12844579.74	8848327.28	7.74	16446287.19	77.47
300	0.001269	9313300	12927744.07	8903291.397	7.97	16536960.70	77.56
300	0.0012674	9360100	13011730.58	8962108.925	8.25	16628480.24	77.65
300	0.0012658	9407400	13096547.97	9018251.017	8.49	16720854.62	77.74
300	0.0012642	9455300	13182205.05	9074974.721	8.72	16814092.75	77.83
300	0.0012626	9503800	13268710.73	9132286.32	8.96	16908203.64	77.91
300	0.001261	9552900	13356074.03	9190192.176	9.19	17003196.42	77.99
300	0.0012516	9859500	13887144.91	9550472.999	10.57	17579586.22	78.30
300	0.00125	9912700	13980657.68	9609043.861	10.76	17680898.20	78.37
300	0.0012484	9966500	14075103.15	9671904.152	10.99	17783167.97	78.43
300	0.0012469	10021000	14164501.79	9735419.213	11.21	17879924.81	78.42
300	0.001233	10539000	15033881.73	9795802.67	11.39	18818561.46	78.56
300	0.0012315	10600000	15132291.07	9860609.386	11.62	18924561.89	78.53
300	0.00123	10662000	15231629.57	9926092.302	11.84	19031514.71	78.50
300	0.0012285	10724000	15331906.84	9988347.674	12.02	19139429.59	78.47
300	0.001227	10787000	15433132.59	10051214.95	12.20	19248316.37	78.44
300	0.0012255	10850000	15535316.64	10118689.04	12.42	19358184.95	78.42
300	0.001224	10915000	15638468.94	10182838.6	12.59	19469045.39	78.37
300	0.0012225	10980000	15742599.57	10251689.8	12.81	19580907.86	78.33
300	0.001221	11045000	15847718.71	10317149.47	12.98	19693782.64	78.30
300	0.0012136	11384000	16381127.09	10658585.71	13.87	20265803.86	78.02
300	0.0012121	11454000	16492327.93	10728064.05	14.04	20384903.61	77.97
300	0.0012107	11525000	16597073.95	10798230.22	14.20	20497044.05	77.85
300	0.0012092	11596000	16710339.47	10869091.52	14.37	20618255.94	77.80
300	0.0012077	11668000	16824689.52	10940655.35	14.53	20740577.06	77.76
300	0.0011947	12353000	17862908.07	11012929.18	14.69	21848928.43	76.87
300	0.0011933	12433000	17979956.01	11081337.45	14.80	21973643.14	76.74
300	0.0011364	16589000	23766876.74	13965628.54	18.20	28092256.76	69.34
300	0.0011351	16709000	23926324.16	14055508.62	18.22	28259767.84	69.13
300	0.0011338	16830000	24087179.35	14152703.55	18.28	28428709.65	68.92

300	0.0011325	16952000	24249456.63	14244262.53	18.30	28599096.61	68.71
300	0.0011236	17835000	25399795.81	14343274.88	18.36	29805582.20	67.12
300	0.0011223	17966000	25573748.72	14436547.67	18.38	29987828.81	66.91
300	0.0011211	18098000	25735702.01	14530660.57	18.40	30157459.01	66.63
300	0.0011198	18231000	25912663.04	14632437.67	18.45	30342759.70	66.43
300	0.0011186	18365000	26077420.81	14728317.72	18.46	30515236.96	66.16
300	0.0011173	18500000	26257450.45	14825064.11	18.48	30703652.59	65.97
300	0.0011161	18636000	26425069.2	14922685.57	18.48	30879033.74	65.70
300	0.0011148	18774000	26608229.42	15021190.95	18.49	31070626.60	65.50
300	0.0011136	18912000	26778767.05	15127723.5	18.56	31248969.87	65.23
300	0.0011123	19052000	26965121.31	15228088.47	18.55	31443803.79	65.04
300	0.0011111	19193000	27138637.12	15329365.22	18.57	31625168.80	64.77
300	0.0011099	19335000	27313603.95	15431563.03	18.57	31808005.86	64.51
300	0.0011086	19479000	27504805.22	15534691.31	18.57	32007757.02	64.32
300	0.0011074	19623000	27682840.7	15638759.56	18.57	32193706.78	64.06
300	0.0011062	19769000	27862371.41	15743777.43	18.58	32381173.03	63.80
300	0.001105	19916000	28043412.04	15842152.83	18.52	32570170.55	63.54
300	0.0011038	20064000	28225977.46	15949029.72	18.52	32760714.27	63.28
300	0.0010384	30752000	40990817.55	21226410.9	16.43	45995143.63	49.57
300	0.0010373	30983000	41263045.14	21361372.56	16.32	46275896.16	49.36
300	0.0010363	31216000	41512528.36	21508844.21	16.26	46533148.64	49.07
300	0.0010352	31450000	41789185.88	21646149.46	16.15	46818373.63	48.87
300	0.0010341	31687000	42068198.71	21796185.52	16.10	47105976.33	48.66
300	0.0010331	31924000	42323911.12	21935881.77	15.99	47369517.20	48.38
300	0.001032	32164000	42607488.41	22088534.25	15.94	47661727.33	48.18
300	0.0010235	34144000	44882555.46	22230670.08	15.83	50004271.69	46.45
300	0.0010225	34399000	45160298.25	22373994.52	15.72	50290043.54	46.20
300	0.0010215	34656000	45440236.66	22530617.43	15.67	50578030.30	45.94
300	0.0010204	34915000	45750730.22	22676455.55	15.56	50897399.41	45.78
300	0.0010194	35176000	46035348.91	22823518.5	15.45	51190107.15	45.53
300	0.0010183	35439000	46351043.29	22971818.3	15.34	51514721.99	45.36
300	0.0010173	35703000	46640438.32	23121367.14	15.24	51812247.06	45.12
300	0.0010163	35970000	46932142.28	23284802.16	15.19	52112100.67	44.88
300	0.0010152	36238000	47255710.44	23436992.88	15.09	52444656.17	44.72
300	0.0010142	36508000	47552337.07	23590471.09	14.99	52749473.85	44.49
300	0.0010132	36780000	47851343.61	23745249.58	14.88	53056691.27	44.25
300	0.0010121	37054000	48183027.66	23901341.27	14.78	53397430.23	44.11
300	0.0010111	37329000	48487108.81	24058759.26	14.68	53709764.07	43.88
300	0.0010101	37607000	48793643.6	24217516.8	14.58	54024571.57	43.66

300	0.0010091	37886000	49102656.43	24377627.3	14.48	54341877.19	43.44
300	0.0010081	38168000	49414171.97	24539104.33	14.38	54661705.67	43.21
300	0.001007	38451000	49759759.55	24701961.62	14.29	55016460.84	43.08
300	0.001006	38736000	50076612.53	24866213.09	14.19	55341669.29	42.87
300	0.001005	39024000	50396046.73	25031872.82	14.10	55669479.32	42.65
300	0.001004	39313000	50718088.11	25198955.04	14.00	55999916.96	42.45
300	0.001003	39604000	51042762.98	25353375.69	13.85	56333008.59	42.24
300	0.001002	39897000	51370097.98	25523224.85	13.76	56668780.89	42.04
300	0.0009940 4	42315000	54073810.71	25694539.09	13.66	59440396.00	40.47
300	0.0009930 5	42626000	54422686.46	25867333.35	13.57	59797810.02	40.28
300	0.0009920 6	42940000	54774447.89	26027041.18	13.42	60158130.55	40.10
300	0.0009910 8	43255000	55125527.42	26202714.63	13.34	60517703.32	39.91
300	0.0009901	43573000	55479492.91	26379912.79	13.25	60880182.59	39.72
300	0.0009891 2	43893000	55836373.9	26558651.36	13.16	61245597.97	39.53
300	0.0009881 4	44215000	56196200.31	26723861.82	13.02	61613979.47	39.35
300	0.0009871 7	44539000	56555285.28	26905597.43	12.94	61981552.66	39.16
300	0.0009861 9	44865000	56921063.06	27073582.42	12.79	62355926.87	38.99
300	0.0009852 2	45193000	57286099.2	27258374.87	12.72	62729492.31	38.80
300	0.0009842 5	45524000	57654141.46	27429189.88	12.57	63106084.38	38.62
300	0.0009832 8	45856000	58025220.75	27617100.45	12.50	63485734.09	38.45
300	0.0009823 2	46191000	58395495.47	27790802.32	12.36	63864511.23	38.26
300	0.0009813 5	46528000	58772711.15	27981893.78	12.28	64250338.51	38.09
300	0.0009803 9	46867000	59149121.58	28158540.76	12.15	64635292.25	37.91
300	0.0009794 3	47209000	59528631.28	28352877.43	12.08	65023365.70	37.74
300	0.0009578	55701000	68951570.46	31466267.75	10.30	74644351.81	34.01

	5						
300	0.0009569 4	56099000	69389830.09	31671518.91	10.18	75091202.29	33.85
300	0.0009560 2	56500000	69836573.08	31878481.5	10.07	75546650.76	33.71
300	0.0009551 1	56903000	70282125.69	32087172.75	9.97	76000834.30	33.56
300	0.0009478 7	60220000	73961472.26	32297610.11	9.86	79749567.79	32.43
300	0.0009469 7	60646000	74436145.04	32509811.22	9.76	80232956.22	32.30
300	0.0009460 7	61075000	74914778.71	32704266.89	9.59	80720325.68	32.17
300	0.0009451 8	61506000	75392030.71	32919885	9.48	81206236.30	32.03
300	0.0009442 9	61940000	75873238.75	33137319.49	9.39	81696122.79	31.90
300	0.0009434	62377000	76358444.79	33356588.9	9.29	82190027.17	31.76
300	0.0009425 1	62817000	76847691.33	33577711.99	9.19	82687992.02	31.63
300	0.0009416 2	63259000	77341021.47	33800707.78	9.09	83190060.48	31.51
300	0.0009407 3	63704000	77838478.89	34005072.47	8.93	83696276.30	31.38
300	0.0009398 5	64152000	78334448.22	34231697.04	8.84	84200925.44	31.25
300	0.0009389 7	64602000	78834539.25	34460250.97	8.75	84709716.02	31.13
300	0.0009380 9	65055000	79338795.92	34669718.31	8.60	85222692.08	31.00
300	0.0009372 1	65511000	79847262.81	34902011.23	8.51	85739898.22	30.88
300	0.0009363 3	65970000	80359985.06	35136292.32	8.43	86261379.67	30.76
300	0.0009354 5	66431000	80877008.45	35351017.82	8.28	86787182.27	30.64
300	0.0009345 8	66896000	81392430.14	35589152.25	8.20	87311303.11	30.52
300	0.0009337 1	67363000	81912146.57	35829335.87	8.12	87839738.38	30.40

300	0.0009328 4	67833000	82436203.84	36049480.94	7.97	88372534.22	30.28
300	0.0009319 7	68305000	82964648.64	36293636.62	7.89	88909737.38	30.17
300	0.0009311	68781000	83497528.32	36517428.95	7.75	89451395.27	30.05
300	0.0009302 3	69259000	84034890.86	36765637.06	7.68	89997555.96	29.94
300	0.0009293 7	69741000	84570530.34	36993150.63	7.54	90541912.07	29.83
300	0.0009285 1	70225000	85110645.41	37222462.75	7.41	91090763.37	29.71
300	0.0009208 1	74714000	90154066.93	37476804.19	7.34	96213286.94	28.78
300	0.0009199 6	75228000	90734615.55	37709950.17	7.20	96802665.98	28.68
300	0.0009191 2	75745000	91313172.99	37968551.87	7.14	97389969.41	28.58
300	0.0009182 7	76265000	91903568.19	38205610.4	7.01	97989234.43	28.49
300	0.0009174 3	76787000	92491963.15	38444560.29	6.88	98586414.42	28.39
300	0.0009165 9	77313000	93085328.53	38709611.81	6.82	99188584.31	28.29
300	0.0009157 5	77842000	93683718.94	38952594.12	6.70	99795798.80	28.20
300	0.0009149 1	78375000	94287189.8	39197525.94	6.57	100408113.3 5	28.11
300	0.0009140 8	78910000	94888521.52	39469225.61	6.52	101018202.8 0	28.02
300	0.0009132 4	79448000	95502260.43	39718314.3	6.40	101640824.5 8	27.93
300	0.0009124 1	79990000	96113850.01	39969412.91	6.28	102261210.7 2	27.84
300	0.0008968 6	90892000	108596688.2	43174705.71	5.07	114912499.8 1	26.43
300	0.0008960 6	91499000	109295787.5	43451269.92	4.97	115620456.7 1	26.36
300	0.0008952 6	92109000	110000906.1	43730103.68	4.87	116334451.9 3	26.30
300	0.0008881	97761000	116591169.9	44014081.53	4.78	123005022.2	25.82

						4	
300	0.0008873 1	98406000	117350418.5	44294672.58	4.68	123773227.3 2	25.78
300	0.0008865 2	99055000	118116321.8	44580454.87	4.59	124548106.3 5	25.74
300	0.0008810 6	10370000 0	123598140.9	44868600.96	4.49	130092490.9 7	25.45
300	0.0008802 8	10438000 0	124409073.4	45156188.48	4.40	130912437.7 9	25.42
300	0.0008795 1	10506000 0	125216671.2	45446140.03	4.30	131728953.1 9	25.38
300	0.0008787 3	10575000 0	126041995	45738479.82	4.20	132563329.6 8	25.36
300	0.0008779 6	10644000 0	126863966.9	46033232.37	4.11	133394257.1 4	25.32
300	0.0008771 9	10713000 0	127693206	46327377.56	4.02	134232470.8 2	25.30
300	0.0008764 2	10783000 0	128529798.2	46627005.17	3.93	135078056.5 4	25.27
300	0.0008756 6	10853000 0	129362821	46926025.27	3.83	135919974.7 2	25.24
300	0.0008748 9	10923000 0	130214283.5	47227507.84	3.74	136780468.5 9	25.22
300	0.0008741 3	10994000 0	131062156.9	47531478.2	3.65	137637274.9 6	25.19
300	0.0008733 6	11065000 0	131928844	47834789.49	3.56	138513031.5 6	25.18
300	0.0008726	11137000 0	132791923.3	48143786.49	3.47	139385081.4 5	25.15
300	0.0008718 4	11209000 0	133662691.1	48452123.86	3.38	140264838.7 9	25.14
300	0.0008710 8	11281000 0	134541239.4	48763000.01	3.29	141152395.3 6	25.12
300	0.0008703 2	11354000 0	135427661.1	49076441.13	3.20	142047844.3 7	25.11
300	0.0008635 6	12027000 0	143674224.8	49389168.31	3.11	150375545.0 7	25.03
300	0.0008628 1	12104000 0	144631080.5	49707791.91	3.03	151341496.8 8	25.03
300	0.0008620	12181000	145583755.5	50025700.58	2.94	152303165.4	25.03

	7	0				1	
300	0.0008613 3	12259000 0	146545054.6	50346226.48	2.85	153273476.5 0	25.03
300	0.0008605 9	12337000 0	147515082.9	50669396.7	2.77	154252535.5 2	25.03
300	0.0008598 5	12415000 0	148493947.5	50995238.67	2.68	155240449.5 0	25.04
300	0.0008591 1	12494000 0	149481757.1	51320307.69	2.60	156237327.1 8	25.05
300	0.0008583 7	12573000 0	150478622.1	51651548.01	2.52	157243279.0 4	25.06
300	0.0008576 3	12653000 0	151484654.7	51982014.04	2.43	158258417.3 4	25.08
300	0.0008569	12733000 0	152486186	52315206.24	2.35	159268949.8 7	25.08
300	0.0008561 6	12813000 0	153510769.9	52651152.97	2.27	160302677.0 6	25.11
300	0.0008554 3	12894000 0	154530829.2	52986264.7	2.18	161331774.7 1	25.12
300	0.0008547	12975000 0	155560261.6	53327776.98	2.10	162370263.9 7	25.14
300	0.0008539 7	13057000 0	156599183.8	53668452.39	2.02	163418261.6 1	25.16
300	0.0008532 4	13139000 0	157647714.4	54011938.12	1.94	164475886.2 9	25.18
300	0.0008525 1	13222000 0	158705973.9	54358263.48	1.86	165543258.5 8	25.20
300	0.0008517 9	13305000 0	159759386.1	54707458.16	1.79	166605677.0 7	25.22
300	0.0008510 6	13389000 0	160837335.4	55055750.77	1.70	167692776.5 3	25.25
300	0.0008503 4	13472000 0	161910412	55410743.09	1.63	168774896.2 8	25.28
300	0.0008496 2	13557000 0	162993437.9	55764831.04	1.55	169866983.7 8	25.30
300	0.0008489	13642000 0	164086538.6	56121846.41	1.48	170969164.5 2	25.33
300	0.0008481 8	13727000 0	165189841.6	56481819.9	1.40	172081566.0 4	25.36
300	0.0008474	13812000	166303476.5	56840821.17	1.32	173204318.0	25.40

	6	0				1	
300	0.0008467 4	13898000 0	167427575.1	57206771.61	1.25	174337552.2 6	25.44
300	0.0008417 5	14513000 0	175516997.9	57571746.94	1.18	182490805.4 8	25.74
300	0.0008410 4	14603000 0	176712098.8	57939739.91	1.10	183695062.1 7	25.79
300	0.0008403 4	14693000 0	177901543.8	58310782.26	1.03	184893552.2 5	25.84
300	0.0008396 3	14784000 0	179119464.6	58684906.12	0.96	186120665.8 5	25.89
300	0.0008389 3	14875000 0	180331700.9	59062144.09	0.89	187341983.6 6	25.94
300	0.0008354 2	15337000 0	186587232.1	59438331.91	0.82	193643327.0 8	26.26
300	0.0008347 2	15431000 0	187871174.5	59817630.42	0.75	194936461.0 3	26.33

ДОДАТОК Г: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ

Критичні властивості CO₂:

- критична температура 304.13K;
- критична плотність 467.6 K;
- критичний тиск 7377300 Pa.

У таблиці наведено порівняння тиску в критичній точці, отримане з експериментальних даних і перевірених за рівнянням стану Редліха-Квонга-Анг'є з урахуванням масштабного рівняння стану та класичними функціями ймовірності виникнення коливань температури і щільності. Результати аналізу показали хороше співпадіння значень тиску.

		NIST	RKA_scaled	P rel err
T, K	Ro, kg/m ³	P, Pa	P, Pa	%
304.13	467.6	7377600	7377597.66	-0.000032

ДОДАТОК Д: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ЗНАЧЕНЬ ТИСКУ НАСИЧЕНИХ ПАР І ОТРИМАНИХ ЗА МЕТОДОМ ЛІ- КЕСЛЕРА В ДВОХФАЗНІЙ ОБЛАСТІ

Результати аналізу дали хороше порівняння експериментальних і розрахункових значень (Таблиця 1).

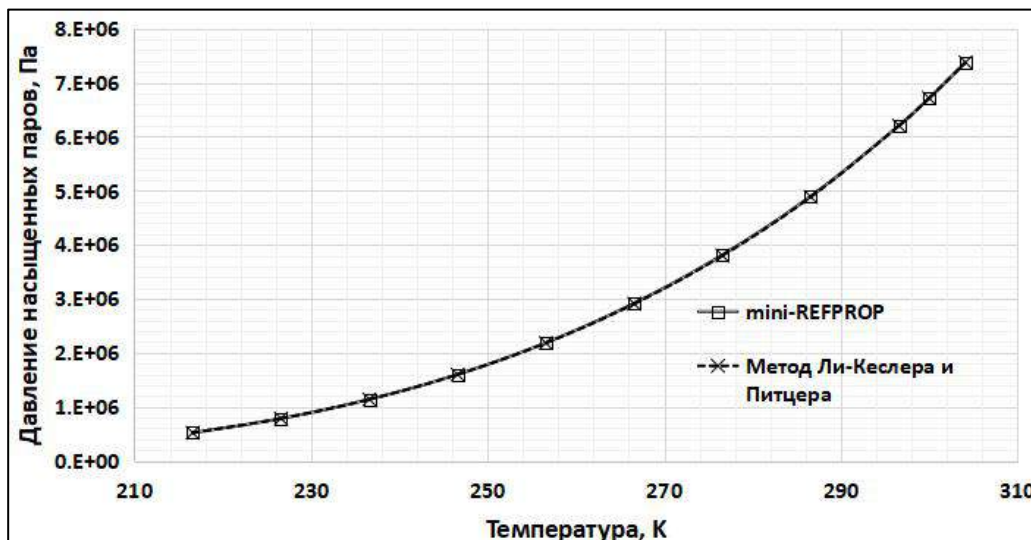


Рис. 1. Валідація методу Лі-Кеслера та Пітцера з базовими даними з mini-REFPROP

Таблиця 1. Чисельний аналіз значень тиску насичених пар

	NIST	Lee-Kesler	
Temperature, K	P_vp, Pa	P_vp, Pa	rel err, %
216.6	518140	519104.6563	0.186
226.6	783110	783726.0602	0.079
236.6	1138200	1137680.184	-0.046
246.6	1600400	1597345.163	-0.191
256.6	2187400	2180354.742	-0.322
266.6	2918400	2906419.441	-0.411
276.6	3814300	3798655.701	-0.410
286.6	4900000	4885532.282	-0.295
296.6	6208400	6203605.779	-0.077
300	6713100	6712583.4	-0.008
304.12	7375900	7375792.323	-0.001

ДОДАТОК Е: ЧИСЛЕННЕ ПОРІВНЯННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОТРИМАНИХ ЗА РІВНЯННЯМ СТАНУ РЕДЛІХА-КВОНГА-АНГ'Є ІЗОТЕРМ ДЛЯ ОБЛАСТІ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ

Результати тиску, де RKA original - результати для оригінального рівняння RKA, RKA corr - результати для модифікованого рівняння RKA з розділу 4, RKA scaled - результати для масштабованого рівняння стану розділу 4.

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану RKA ізоترم. Температура 300 К

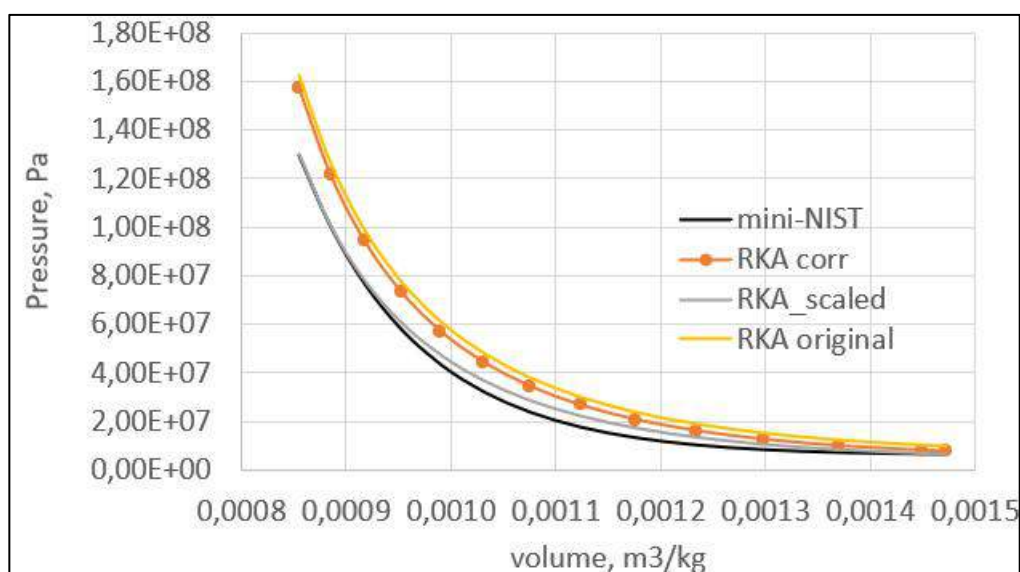
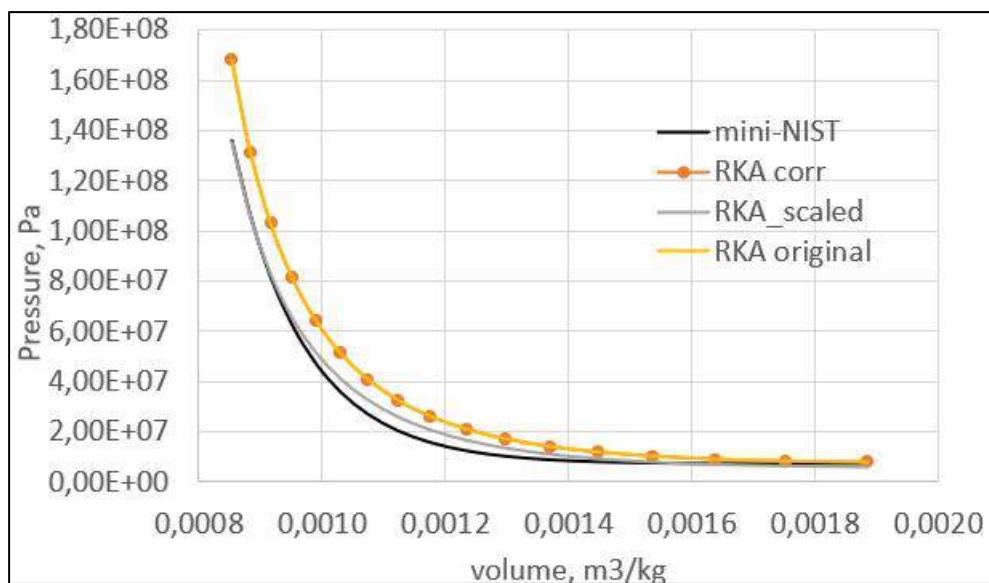


Рис. 1 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану RKA ізоترم. Температура 300 К

P, Pa mini-NIST	Ro, kg/m ³ mini-NIST	v, m ³ /kg mini NIST	P, Pa RKA original	rel err, %	P, Pa RKA corr	rel err, %	P, Pa RKA scaled	rel err %
6713100	679.24	0.0015	9643340	44	7657488	14	6340862	-6
6808600	690	0.0014	10093395	48	8054420	18	6669545	-2
7415300	730	0.0014	12167873	64	9926961	34	8220123	11
8561800	770	0.0013	14982936	75	12533900	46	10378825	21
10479000	810	0.0012	18706533	79	16043871	53	13285293	27

13457000	850	0.0012	23557640	75	20675807	54	17120816	27
17835000	890	0.0011	29805582	67	26699324	50	22108651	24
24003000	930	0.0011	37781461	57	34446111	44	28523458	19
32406000	970	0.0010	47956387	48	44386841	37	36754982	13
43573000	1010	0.0010	60880183	40	57072477	31	47259454	8
58127000	1050	0.0010	77385764	33	73335501	26	60726220	4
76787000	1090	0.0009	98586414	28	94289578	23	78077460	2
10036000 0	1130	0.0009	126098151	26	12155094 5	21	10065151 6	0
12975000 0	1170	0.0009	162370264	25	15756893 5	21	13047658 5	1

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 304 К**

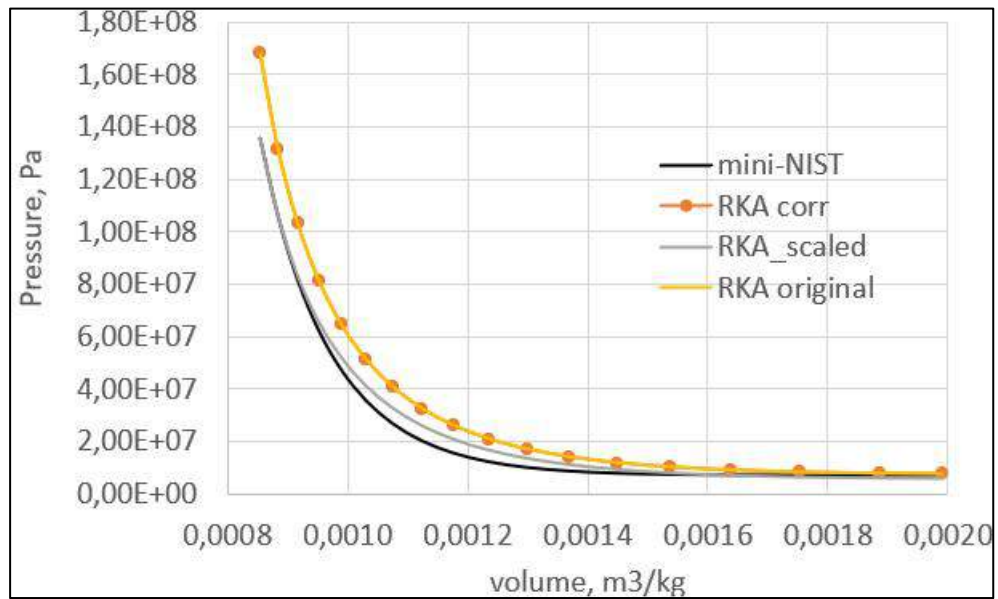


**Рис. 2 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 304 К**

P, Pa mini-NIST	Ro, kg/m³ mini- NIST	v, m³/kg mini NIST	P, Pa RKA original	rel err, %	P, Pa RKA corr	rel err, %	P, Pa RKA scaled	rel err %
7355500	530.3	0.0019	7680052	4	7636805	4	6165410	-16
7372300	570	0.0018	8150699	11	8101703	10	6540735	-11
7448800	610	0.0016	8920872	20	8865828	19	7157635	-4

7655300	650	0.0015	10074409	32	10013088	31	8083850	6
8095700	690	0.0014	11716321	45	11648492	44	9404159	16
8918200	730	0.0014	13965861	57	13891315	56	1121485 3	26
10309000	770	0.0013	16970379	65	16888910	64	1363489 7	32
12501000	810	0.0012	20899560	67	20810984	66	1680129 9	34
15783000	850	0.0012	25975331	65	25879464	64	2089322 6	32
20498000	890	0.0011	32470399	58	32367066	58	2613085 2	27
27033000	930	0.0011	40719848	51	40608894	50	3278471 4	21
35840000	970	0.0010	51201391	43	51082647	43	4124047 2	15
47451000	1010	0.0010	64471348	36	64344681	36	5194728 9	9
62492000	1050	0.0010	81374058	30	81239322	30	6558681 2	5
81683000	1090	0.0009	10303737 0	26	10289443 1	26	8306959 7	2
10583000 0	1130	0.0009	13109868 7	24	13094741 9	24	1057175 71	0
13584000 0	1170	0.0009	16803992 4	24	16788020 3	24	1355344 57	0

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 304.11 К**



**Рис. 3 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 304.11 К**

P, Pa mini- NIST	Ro, kg/m ³ mini- NIST	v, m ³ /kg mini NIST	P, Pa RKA original	rel err, %	P, Pa RKA corr	rel err, %	P, Pa RKA scaled	rel err %
7374200	502.0 9	0.0020	7506855	2	7500811	2	6049032	-18
7375900	530	0.0019	7705694	4	7699052	4	6215664	-16
7395500	570	0.0018	8182669	11	8175137	11	6600021	-11
7475700	610	0.0016	8956703	20	8948242	20	7224170	-3
7686300	650	0.0015	10114375	32	10104949	31	8158012	6
8131700	690	0.0014	11760736	45	11750309	45	9486358	17
8960000	730	0.0014	14015069	56	14003610	56	11305512	26
1035800 0	770	0.0013	17024775	64	17012251	64	13734474	33
1255700 0	810	0.0012	20959587	67	20945971	67	16910277	35
1584700 0	850	0.0012	26041512	64	26026776	64	21012155	33
2057100 0	890	0.0011	32543353	58	32527468	58	26260349	28

2711600 0	930	0.0011	40800301	50	40783245	50	32925472	21
3593400 0	970	0.0010	51290251	43	51271997	43	41393340	15
4755700 0	1010	0.0010	64569702	36	64550231	36	52113235	10
6261200 0	1050	0.0010	81483307	30	81462595	30	65767067	5
8181700 0	1090	0.0009	103159316	26	10313734 3	26	83265707	2
1059800 00	1130	0.0009	131235720	24	13121246 7	24	10593155 2	0
1360000 00	1170	0.0009	168195331	24	16817077 9	24	13576904 7	0

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 304.13 К

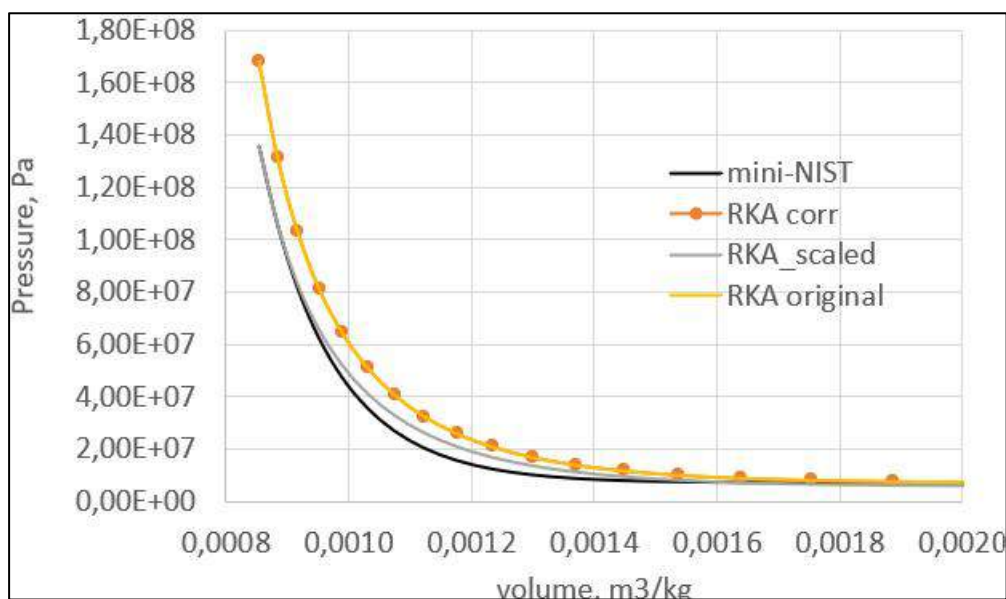


Рис. 4 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 304.13 К

P, Pa	Ro,	v, m³/kg	P, Pa RKA	rel	P, Pa	rel	P, Pa	re
-------	-----	----------	-----------	-----	-------	-----	-------	----

mini-NIST	kg/m ³ mini-NIST	mini NIST	original	err, %	RKA corr	err, %	RKA scaled	l err %
559370	10	0.1000	559678	0	559678	0	451262	-19
2506600	50	0.0200	2510964	0	2510964	0	2024562	-19
4029700	90	0.0111	4044402	0	4044402	0	3260955	-19
5183900	130	0.0077	5213343	1	5213343	1	4203459	-19
6024600	170	0.0059	6068748	1	6068748	1	4893163	-19
6606400	210	0.0048	6659746	1	6659746	1	5369678	-19
6982400	250	0.0040	7034180	1	7034180	1	5671579	-19
7203600	290	0.0034	7239533	0	7239533	0	5837154	-19
7316900	330	0.0030	7323524	0	7323524	0	5904875	-19
7363500	370	0.0027	7334817	0	7334817	0	5913980	-20
7376200	410	0.0024	7323916	-1	7323916	-1	5905191	-20
7377600	450	0.0022	7344070	0	7344070	0	5921441	-20
7377600	490	0.0020	7452340	1	7452340	1	6008737	-19
7379600	530	0.0019	7710850	4	7710850	4	6217171	-16
7399700	570	0.0018	8188481	11	8188481	11	6602279	-11
7480600	610	0.0016	8963217	20	8963217	20	7226940	-3
7692000	650	0.0015	10121640	32	10121640	32	8160964	6
8138200	690	0.0014	11768810	45	11768810	45	9489058	17
8967600	730	0.0014	14024014	56	14024014	56	11307404	26

1036700 0	770	0.0013	17034663	64	17034663	64	13734856	32
1256700 0	810	0.0012	20970499	67	20970499	67	16908275	35
1585900 0	850	0.0012	26053544	64	26053544	64	21006677	32
2058500 0	890	0.0011	32556615	58	32556615	58	26250029	28
2713200 0	930	0.0011	40814926	50	40814926	50	32908612	21
3595100 0	970	0.0010	51306405	43	51306405	43	41367772	15
4757700 0	1010	0.0010	64587582	36	64587582	36	52076235	9
6263400 0	1050	0.0010	81503168	30	81503168	30	65715080	5
8184200 0	1090	0.0009	103181485	26	103181485	26	83194061	2
1060100 00	1130	0.0009	131260632	24	131260632	24	105833958	0
1360300 00	1170	0.0009	168223584	24	168223584	24	135636767	0

**Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 305К**

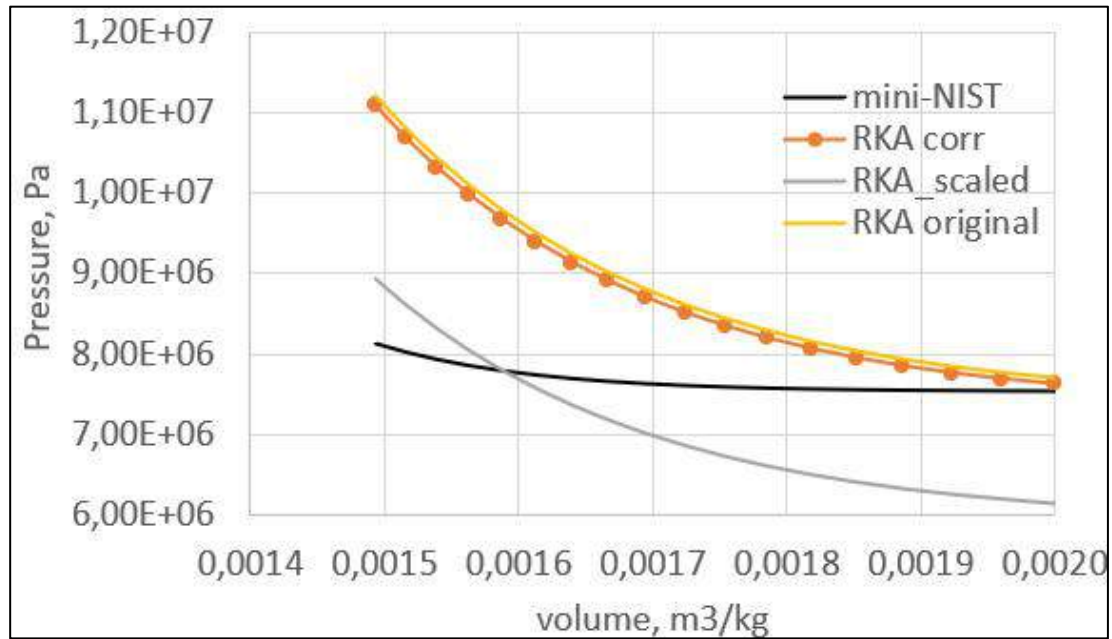


Рис. 5 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА
ізотерм. Температура 305 К

P, Pa mini- NIST	Ro, kg/m ³ mini- NIST	v, m ³ /kg mini NIST	P, Pa RKA original	rel err, %	P, Pa RKA corr	rel err, %	P, Pa RKA scaled	rel err %
7533700	500	0.0020	7704301	2	7624128	1	6148481	- 18
7536700	510	0.0020	7769236	3	7686244	2	6205323	- 18
7540500	520	0.0019	7845739	4	7759892	3	6264781	- 17
7545400	530	0.0019	7934946	5	7846208	4	6334467	- 16
7551900	540	0.0019	8037759	6	7946100	5	6415113	- 15
7560500	550	0.0018	8155718	8	8061098	7	6507953	- 14
7571700	560	0.0018	8289839	9	8192224	8	6613815	- 13

7586300	570	0.0018	8441032	11	8340396	10	6733438	-11
7604900	580	0.0017	8611274	13	8507576	12	6868408	-10
7628500	590	0.0017	8801012	15	8694228	14	7019097	-8
7658100	600	0.0017	9011776	18	8901878	16	7186739	-6
7694600	610	0.0016	9246267	20	9133209	19	7373499	-4
7739500	620	0.0016	9503853	23	9387619	21	7578891	-2
7794000	630	0.0016	9787446	26	9668001	24	7805251	0
7859800	640	0.0016	10098255	28	9975569	27	8053560	2
7938500	650	0.0015	10437359	31	10311408	30	8324692	5
8032000	660	0.0015	10807351	35	10678103	33	8620736	7
8142500	670	0.0015	11211422	38	11078833	36	8944257	10

РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ МЕТОДУ 2. ВИЗНАЧЕННЯ ТИСКУ ІЗ МАСШТАБОВОГО РІВНЯННЯ СТАНУ В ОБЛАСТІ CO₂ ПОБЛИЗУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ

Результати для методу 1 показують значну відносну похибку для критичної температури $T=304.13$ К, особливо області молярного об'єму $0.0017\text{--}0.02$ м³/кг. Тому для Методу 2 ця область об'ємів перевірялася точніше.

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 304.13 К

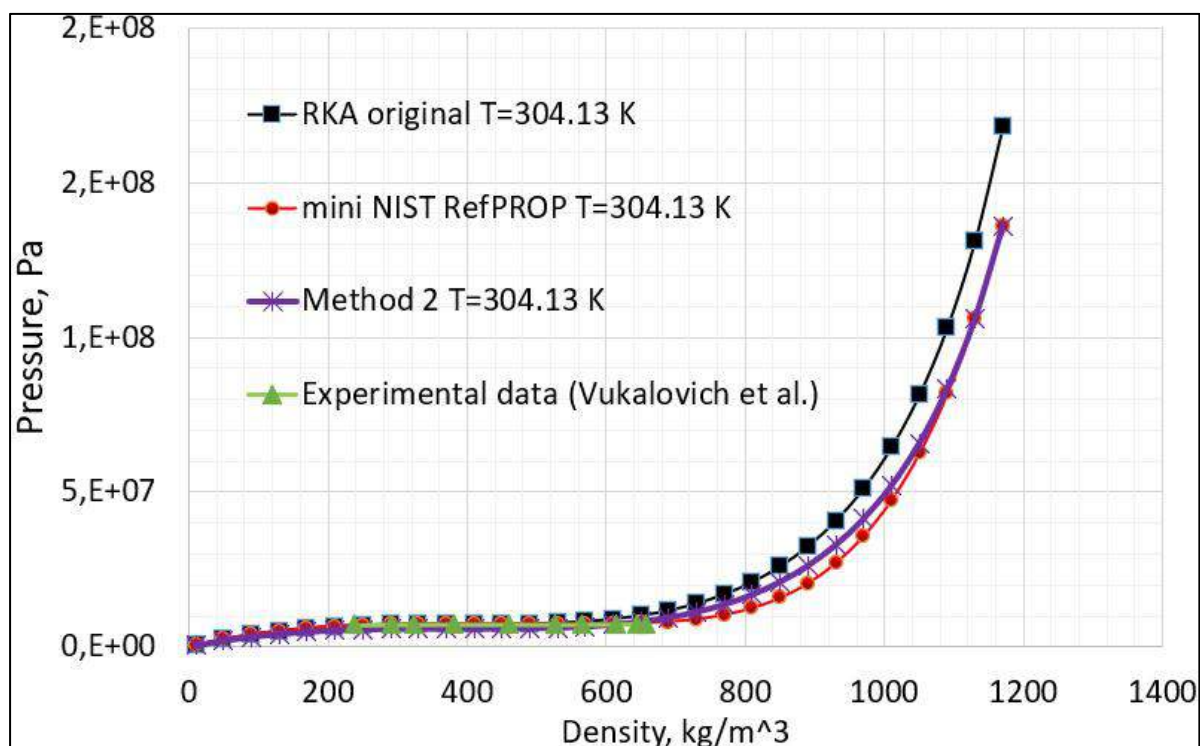


Рис. 6 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізоترم. Температура 304.13 К

T, K	P, Pa mini NIST	Ro, m ³ /kg mini NIST	v, m ³ /kg mini NIST	P from Method 2, Pa	rel err, %
304.13	7375900.00	494.91	2.02E-03		
304.13	7375900.00	500.00	2.00E-03	7377261.20	0.02
304.13	7375900.00	501.00	2.00E-03	7377255.51	0.02
304.13	7376000.00	502.00	1.99E-03	7377249.20	0.02
304.13	7376000.00	503.00	1.99E-03	7377242.24	0.02
304.13	7376000.00	504.00	1.98E-03	7377234.57	0.02
304.13	7376000.00	505.00	1.98E-03	7377226.15	0.02
304.13	7376000.00	506.00	1.98E-03	7377216.93	0.02
304.13	7376100.00	507.00	1.97E-03	7377206.87	0.02
304.13	7376100.00	508.00	1.97E-03	7377195.91	0.01
304.13	7376100.00	509.00	1.96E-03	7377184.00	0.01
304.13	7376100.00	510.00	1.96E-03	7377171.09	0.01
304.13	7376200.00	511.00	1.96E-03	7377157.12	0.01
304.13	7376200.00	512.00	1.95E-03	7377142.04	0.01

304.13	7376200.00	513.00	1.95E-03	7377125.79	0.01
304.13	7376300.00	514.00	1.95E-03	7377108.31	0.01
304.13	7376300.00	515.00	1.94E-03	7377089.55	0.01
304.13	7376400.00	516.00	1.94E-03	7377069.45	0.01
304.13	7376400.00	517.00	1.93E-03	7377047.93	0.01
304.13	7376500.00	518.00	1.93E-03	7377024.95	0.01
304.13	7376600.00	519.00	1.93E-03	7377000.44	0.01
304.13	7376600.00	520.00	1.92E-03	7376974.33	0.01
304.13	7376700.00	521.00	1.92E-03	7376946.56	0.00
304.13	7376800.00	522.00	1.92E-03	7376917.07	0.00
304.13	7376900.00	523.00	1.91E-03	7376885.78	0.00
304.13	7377000.00	524.00	1.91E-03	7376852.63	0.00
304.13	7377100.00	525.00	1.90E-03	7376817.55	0.00
304.13	7377200.00	526.00	1.90E-03	7376780.46	-0.01
304.13	7377300.00	527.00	1.90E-03	7376741.31	-0.01
304.13	7377500.00	528.00	1.89E-03	7376700.02	-0.01
304.13	7377600.00	529.00	1.89E-03	7376656.52	-0.01
304.13	7377800.00	530.00	1.89E-03	7376610.73	-0.02
304.13	7377900.00	531.00	1.88E-03	7376562.58	-0.02
304.13	7378100.00	532.00	1.88E-03	7376512.00	-0.02
304.13	7378300.00	533.00	1.88E-03	7376458.92	-0.02
304.13	7378400.00	534.00	1.87E-03	7376403.26	-0.03
304.13	7378600.00	535.00	1.87E-03	7376344.94	-0.03
304.13	7378900.00	536.00	1.87E-03	7376283.88	-0.04
304.13	7379100.00	537.00	1.86E-03	7376220.02	-0.04
304.13	7379300.00	538.00	1.86E-03	7376153.28	-0.04
304.13	7379600.00	539.00	1.86E-03	7376083.58	-0.05
304.13	7379800.00	540.00	1.85E-03	7376010.83	-0.05
304.13	7380100.00	541.00	1.85E-03	7375934.97	-0.06
304.13	7380400.00	542.00	1.85E-03	7375855.91	-0.06
304.13	7380700.00	543.00	1.84E-03	7375773.58	-0.07
304.13	7381100.00	544.00	1.84E-03	7375687.89	-0.07
304.13	7381400.00	545.00	1.83E-03	7375598.77	-0.08
304.13	7381800.00	546.00	1.83E-03	7375506.14	-0.09
304.13	7382100.00	547.00	1.83E-03	7375409.92	-0.09
304.13	7382500.00	548.00	1.82E-03	7375310.02	-0.10
304.13	7383000.00	549.00	1.82E-03	7375206.37	-0.11

304.13	7383400.00	550.00	1.82E-03	7375098.89	-0.11
304.13	7383900.00	551.00	1.81E-03	7374987.50	-0.12
304.13	7384400.00	552.00	1.81E-03	7374872.11	-0.13
304.13	7384900.00	553.00	1.81E-03	7374752.65	-0.14
304.13	7385400.00	554.00	1.81E-03	7374629.04	-0.15
304.13	7385900.00	555.00	1.80E-03	7374501.19	-0.15
304.13	7386500.00	556.00	1.80E-03	7374369.02	-0.16
304.13	7387100.00	557.00	1.80E-03	7374232.46	-0.17
304.13	7387700.00	558.00	1.79E-03	7374091.42	-0.18
304.13	7388400.00	559.00	1.79E-03	7373945.82	-0.20
304.13	7389100.00	560.00	1.79E-03	7373795.58	-0.21
304.13	7389800.00	561.00	1.78E-03	7373640.62	-0.22
304.13	7390500.00	562.00	1.78E-03	7373480.86	-0.23
304.13	7391300.00	563.00	1.78E-03	7373316.22	-0.24
304.13	7392100.00	564.00	1.77E-03	7373146.62	-0.26
304.13	7392900.00	565.00	1.77E-03	7372971.97	-0.27
304.13	7393800.00	566.00	1.77E-03	7372792.21	-0.28
304.13	7394700.00	567.00	1.76E-03	7372607.24	-0.30
304.13	7395600.00	568.00	1.76E-03	7372417.00	-0.31
304.13	7396600.00	569.00	1.76E-03	7372221.39	-0.33
304.13	7397600.00	570.00	1.75E-03	7372020.34	-0.35
304.13	7398600.00	571.00	1.75E-03	7371813.78	-0.36
304.13	7399700.00	572.00	1.75E-03	7371601.61	-0.38
304.13	7400800.00	573.00	1.75E-03	7371383.78	-0.40
304.13	7402000.00	574.00	1.74E-03	7371160.18	-0.42
304.13	7403200.00	575.00	1.74E-03	7370930.76	-0.44
304.13	7404400.00	576.00	1.74E-03	7370695.43	-0.46
304.13	7405700.00	577.00	1.73E-03	7370454.10	-0.48
304.13	7407000.00	578.00	1.73E-03	7370206.72	-0.50
304.13	7408300.00	579.00	1.73E-03	7369953.19	-0.52
304.13	7409800.00	580.00	1.72E-03	7369693.45	-0.54
304.13	7411200.00	581.00	1.72E-03	7369427.42	-0.56
304.13	7412700.00	582.00	1.72E-03	7369155.01	-0.59
304.13	7414300.00	583.00	1.72E-03	7368876.17	-0.61
304.13	7415900.00	584.00	1.71E-03	7368590.80	-0.64
304.13	7417500.00	585.00	1.71E-03	7368298.85	-0.66
304.13	7419200.00	586.00	1.71E-03	7368000.22	-0.69

304.13	7421000.00	587.00	1.70E-03	7367694.86	-0.72
304.13	7422800.00	588.00	1.70E-03	7367382.68	-0.75
304.13	7424600.00	589.00	1.70E-03	7367063.62	-0.77
304.13	7426500.00	590.00	1.69E-03	7366737.60	-0.80
304.13	7428500.00	591.00	1.69E-03	7366404.55	-0.84
304.13	7430500.00	592.00	1.69E-03	7366064.39	-0.87
304.13	7432600.00	593.00	1.69E-03	7365717.07	-0.90
304.13	7434800.00	594.00	1.68E-03	7365362.51	-0.93
304.13	7437000.00	595.00	1.68E-03	7365000.63	-0.97
304.13	7439200.00	596.00	1.68E-03	7364631.37	-1.00
304.13	7441600.00	597.00	1.68E-03	7364254.66	-1.04
304.13	7444000.00	598.00	1.67E-03	7363870.44	-1.08
304.13	7446400.00	599.00	1.67E-03	7363478.62	-1.11
304.13	7448900.00	600.00	1.67E-03	7363079.16	-1.15
304.13	7451500.00	601.00	1.66E-03	7362671.97	-1.19
304.13	7454200.00	602.00	1.66E-03	7362257.00	-1.23
304.13	7456900.00	603.00	1.66E-03	7361834.18	-1.27
304.13	7459700.00	604.00	1.66E-03	7361403.44	-1.32
304.13	7462600.00	605.00	1.65E-03	7360964.72	-1.36
304.13	7465600.00	606.00	1.65E-03	7360517.95	-1.41
304.13	7468600.00	607.00	1.65E-03	7360063.08	-1.45
304.13	7471700.00	608.00	1.64E-03	7359600.03	-1.50
304.13	7474900.00	609.00	1.64E-03	7359128.75	-1.55
304.13	7478100.00	610.00	1.64E-03	7358649.17	-1.60
304.13	7481400.00	611.00	1.64E-03	7358161.24	-1.65
304.13	7484900.00	612.00	1.63E-03	7357664.89	-1.70
304.13	7488400.00	613.00	1.63E-03	7357160.06	-1.75
304.13	7491900.00	614.00	1.63E-03	7356646.70	-1.81
304.13	7495600.00	615.00	1.63E-03	7356124.74	-1.86
304.13	7499400.00	616.00	1.62E-03	7355594.13	-1.92
304.13	7503200.00	617.00	1.62E-03	7355054.80	-1.97
304.13	7507100.00	618.00	1.62E-03	7354506.71	-2.03
304.13	7511200.00	619.00	1.62E-03	7353949.80	-2.09
304.13	7515300.00	620.00	1.61E-03	7353384.00	-2.15
304.13	7519500.00	621.00	1.61E-03	7352809.27	-2.22
304.13	7523800.00	622.00	1.61E-03	7352225.54	-2.28
304.13	7528200.00	623.00	1.61E-03	7351632.78	-2.35

304.13	7532700.00	624.00	1.60E-03	7351030.91	-2.41
304.13	7537300.00	625.00	1.60E-03	7350419.90	-2.48
304.13	7542000.00	626.00	1.60E-03	7349799.68	-2.55
304.13	7546800.00	627.00	1.59E-03	7349170.21	-2.62
304.13	7551700.00	628.00	1.59E-03	7348531.43	-2.69
304.13	7556700.00	629.00	1.59E-03	7347883.30	-2.76
304.13	7561800.00	630.00	1.59E-03	7347225.77	-2.84
304.13	7567000.00	631.00	1.58E-03	7346558.77	-2.91
304.13	7572400.00	632.00	1.58E-03	7345882.28	-2.99
304.13	7577800.00	633.00	1.58E-03	7345196.24	-3.07
304.13	7583400.00	634.00	1.58E-03	7344500.60	-3.15
304.13	7589000.00	635.00	1.57E-03	7343795.31	-3.23
304.13	7594800.00	636.00	1.57E-03	7343080.33	-3.31
304.13	7600700.00	637.00	1.57E-03	7342355.62	-3.40
304.13	7606800.00	638.00	1.57E-03	7341621.13	-3.49
304.13	7612900.00	639.00	1.56E-03	7340876.81	-3.57
304.13	7619200.00	640.00	1.56E-03	7340122.62	-3.66
304.13	7625600.00	641.00	1.56E-03	7339358.53	-3.75
304.13	7632100.00	642.00	1.56E-03	7338584.47	-3.85
304.13	7638800.00	643.00	1.56E-03	7337800.43	-3.94
304.13	7645600.00	644.00	1.55E-03	7337006.34	-4.04
304.13	7652500.00	645.00	1.55E-03	7336202.18	-4.13
304.13	7659600.00	646.00	1.55E-03	7335387.90	-4.23
304.13	7666800.00	647.00	1.55E-03	7334563.47	-4.33
304.13	7674100.00	648.00	1.54E-03	7333728.84	-4.44
304.13	7681600.00	649.00	1.54E-03	7332883.98	-4.54
304.13	7689200.00	650.00	1.54E-03	7332028.84	-4.65
304.13	7696900.00	651.00	1.54E-03	7331163.40	-4.75
304.13	7704800.00	652.00	1.53E-03	7330287.61	-4.86
304.13	7712900.00	653.00	1.53E-03	7329401.45	-4.97
304.13	7721100.00	654.00	1.53E-03	7328504.86	-5.08
304.13	7729400.00	655.00	1.53E-03	7327597.83	-5.20
304.13	7737900.00	656.00	1.52E-03	7326680.32	-5.31
304.13	7746600.00	657.00	1.52E-03	7325752.29	-5.43
304.13	7755400.00	658.00	1.52E-03	7324813.71	-5.55
304.13	7764400.00	659.00	1.52E-03	7323864.54	-5.67
304.13	7773600.00	660.00	1.52E-03	7322904.77	-5.80

304.13	7782900.00	661.00	1.51E-03	7321934.35	-5.92
304.13	7792300.00	662.00	1.51E-03	7320953.25	-6.05
304.13	7802000.00	663.00	1.51E-03	7319961.45	-6.18
304.13	7811800.00	664.00	1.51E-03	7318958.92	-6.31
304.13	7821800.00	665.00	1.50E-03	7317945.62	-6.44
304.13	7832000.00	666.00	1.50E-03	7316921.53	-6.58
304.13	7842300.00	667.00	1.50E-03	7315886.62	-6.71
304.13	7852800.00	668.00	1.50E-03	7314840.87	-6.85
304.13	7863600.00	669.00	1.49E-03	7313784.24	-6.99
304.13	7874400.00	670.00	1.49E-03	7312716.72	-7.13
304.13	7885500.00	671.00	1.49E-03	7311638.27	-7.28
304.13	7896800.00	672.00	1.49E-03	7310548.87	-7.42
304.13	7908300.00	673.00	1.49E-03	7309448.50	-7.57
304.13	7919900.00	674.00	1.48E-03	7308337.14	-7.72
304.13	7931800.00	675.00	1.48E-03	7307214.75	-7.87
304.13	7943800.00	676.00	1.48E-03	7306081.33	-8.03
304.13	7956100.00	677.00	1.48E-03	7304936.83	-8.18
304.13	7968600.00	678.00	1.47E-03	7303781.26	-8.34
304.13	7981200.00	679.00	1.47E-03	7302614.57	-8.50
304.13	7994100.00	680.00	1.47E-03	7301436.76	-8.66
304.13	8007200.00	681.00	1.47E-03	7300247.80	-8.83
304.13	8020500.00	682.00	1.47E-03	7299047.67	-9.00
304.13	8034000.00	683.00	1.46E-03	7297836.36	-9.16
304.13	8047700.00	684.00	1.46E-03	7296613.84	-9.33
304.13	8061700.00	685.00	1.46E-03	7295380.10	-9.51
304.13	8075900.00	686.00	1.46E-03	7294135.12	-9.68
304.13	8090300.00	687.00	1.46E-03	7292878.88	-9.86
304.13	8104900.00	688.00	1.45E-03	7291611.37	-10.03

РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ МЕТОДУ 3. ВИЗНАЧЕННЯ ТИСКУ ІЗ МАСШТАБОВОГО РІВНЯННЯ СТАНУ В ОБЛАСТІ CO₂ ПОБЛИЗУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ ІЗ МАСШТАБОВОЮ ГІПОТЕЗОЮ

Результати для методу 3 близькі до результатів методу 1. Функція перемикавання $f(r)$ не здатна зменшити відносну похибку для тиску в порівнянні з експериментальними даними з mini-NIST RefPROP.

Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 304.13 K

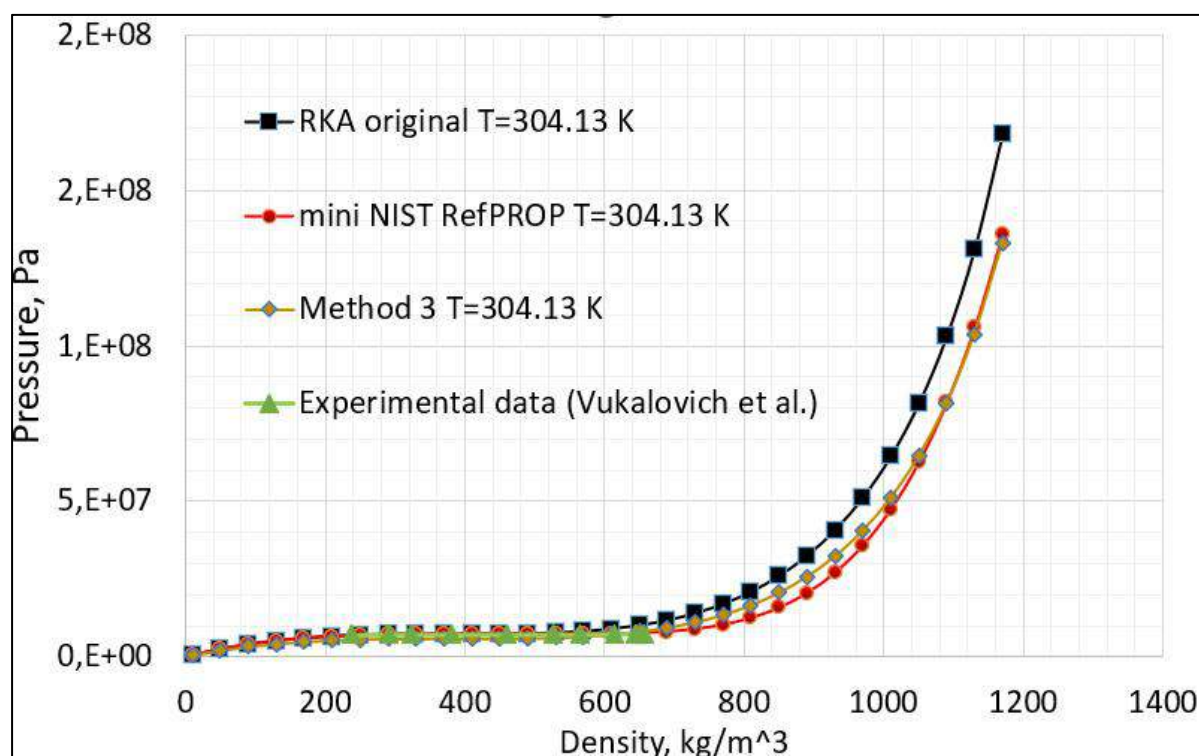


Рис. 7 Порівняння експериментальних і отриманих за рівнянням стану РКА ізотерм. Температура 304.13 K

T, K	P, Pa mini-NIST	ρ , kg/m ³ mini-NIST	v , m ³ /kg mini NIST	P from Method 3, Pa	rel err, %
304.13	559370	10	0.1	589783	5
304.13	2506600	50	0.02	2131617	-15
304.13	4029700	90	0.011111	3343282	-17
304.13	5183900	130	0.0076923	4266936	-18
304.13	6024600	170	0.0058824	4942846	-18

304.13	6606400	210	0.0047619	5409830	-18
304.13	6982400	250	0.004	5705694	-18
304.13	7203600	290	0.0034483	5867957	-19
304.13	7316900	330	0.0030303	5934323	-19
304.13	7363500	370	0.0027027	5943246	-19
304.13	7376200	410	0.002439	5934633	-20
304.13	7377600	450	0.0022222	5950558	-19
304.13	7377600	490	0.0020408	6036109	-18
304.13	7379600	530	0.0018868	6240374	-15
304.13	7399700	570	0.0017544	6617780	-11
304.13	7480600	610	0.0016393	7229947	-3
304.13	7692000	650	0.0015385	8145291	6
304.13	8138200	690	0.0014493	9446823	16
304.13	8967600	730	0.0013699	11228802	25
304.13	10367000	770	0.0012987	13607705	31
304.13	12567000	810	0.0012346	16717656	33
304.13	15859000	850	0.0011765	20734089	31
304.13	20585000	890	0.0011236	25872575	26
304.13	27132000	930	0.0010753	32397986	19
304.13	35951000	970	0.0010309	40687963	13
304.13	47577000	1010	0.0009901	51182256	8
304.13	62634000	1050	0.00095238	64548324	3
304.13	81842000	1090	0.00091743	81677726	0
304.13	106010000	1130	0.00088496	103864825	-2
304.13	136030000	1170	0.0008547	133071578	-2