

# TERRA

## **ПРОГРАММА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА СОСТАВА ФАЗ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ, А ТАКЖЕ ИХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ**

Описываемая программа предназначена для расчета произвольных систем с химическими и фазовыми превращениями. Она позволяет моделировать предельно равновесные состояния и реализует созданный в Московском государственном техническом университете им. Н.Э.Баумана метод и алгоритм расчетов. Программа сопряжена с обширной базой данных свойств индивидуальных веществ, что делает ее пригодной для исследования произвольных по химическому составу композиций.

По сравнению с предшествующим прототипом (программа АСТРА) данный программный продукт обладает гораздо более удобным пользовательским интерфейсом и предоставляет новые возможности по обработке и отображению результатов моделирования. Предельное число химических элементов, из которых может состоять исследуемая система, равно пятидесяти; число конденсированных фаз, рассматриваемых в ходе одного расчета, ограничено двумястами, а количество компонентов газовой фазы, образующихся в равновесии (число индивидуальных веществ), может достигать восьмисот. При проведении расчетов для гетерогенных систем возможно использование как модели однокомпонентных несмешивающихся фаз, так и моделей конденсированных растворов.

### **1. Начало работы программы моделирования термодинамически равновесных состояний (TERRA).**

После установки на компьютере всего программного комплекса моделирования фазовых и химических равновесий, в главном меню операционной системы WINDOWS *Пуск/Все Программы* может быть найдена новая группа *Terra*. В этой группе находятся ярлыки (пиктограммы), связанные с программами TERRA и INFO. Для запуска программы TERRA достаточно подвести указатель мыши к ее ярлыку и нажать левую клавишу.



Упростить доступ к программе можно путем размещения ее ярлыка непосредственно на Рабочем столе или в любой удобной для пользователя папке.

В результате вызова программы на экране компьютера появится Основное Окно программы следующего вида:



Рис.1.

Если «провести» указателем мыши по изображению окна или нажать в области окна левую клавишу мыши, то заставка сменится на активное изображение совокупности рабочих элементов программы, как это показано ниже

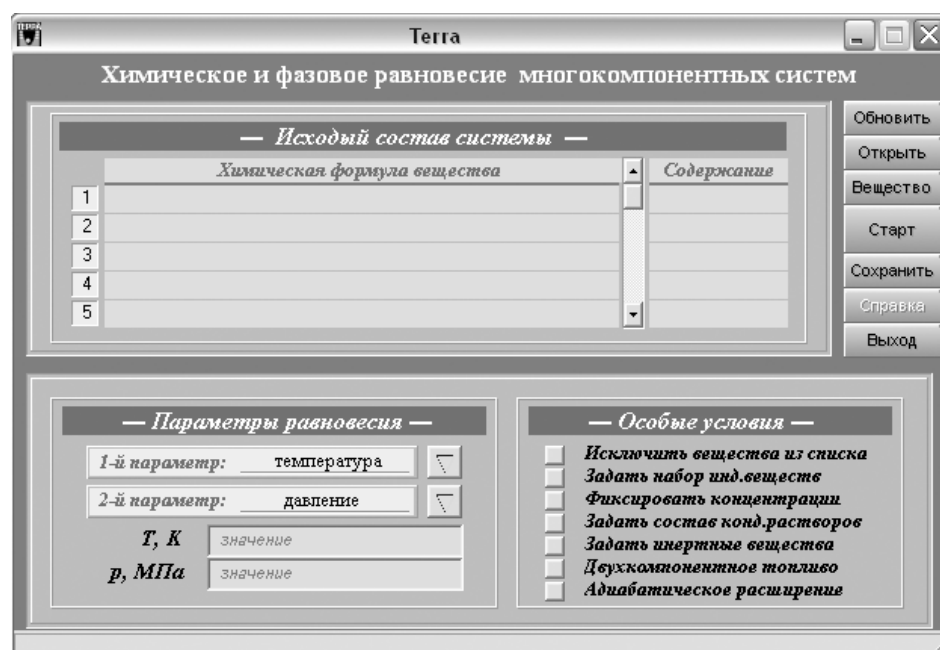


Рис.2.

Можно видеть, что вся область Основного Окна разбита на три информационных подобласти (панели) и содержит группу управляющих элементов (кнопок).

Панель «Исходный состав системы» предназначена для ввода и отображения информации о веществах, определяющих перечень и содержание в системе химических элементов, то есть исходный химический состав.

Панель «Параметры равновесия» служит для выбора тех двух параметров состояния, которые определяют равновесие. Здесь же могут задаваться численные значения параметров и диапазон их изменения.

Панель «Особые условия» содержит управляющие элементы, позволяющие изменять набор индивидуальных веществ, учитываемых при проведении расчетов, и формировать специальные требования к условиям моделирования.

Управляющие кнопки Основного Окна выполняют следующие функции:

- Обновить - очистка всех полей, предназначенных для ввода информации;
- Открыть - открытие файла с исходными данными ранее подготовленного варианта расчета
- Вещество - организация доступа к пользовательской базе данных простых веществ, которая позволяет упростить задание исходного состава системы
- Старт - инициирование вычислительного процесса
- Сохранить - сохранение подготовленного варианта исходных данных в файле
- Справка - вызов справочной информации  
(в настоящий момент эта функция не реализована)
- Выход - завершение работы программы TERRA

Хотя функция Справка явным образом не реализована, тем не менее, оперативная инструкция по использованию программы высвечивается в строке статуса состояния (расположена в самой нижней части окна программы по всей ширине). Строка статуса состояния содержит подсказку о функциональном назначении любого элемента управления, когда к нему подводится курсор. Пример можно увидеть на рис.5.

## 2. Задание исходного состава системы

Программа TERRA предназначена для моделирования *предельно равновесных состояний* сложных систем. Используемый метод расчета не позволяет находить «траекторию» перехода к равновесному состоянию. Поэтому в качестве исходных данных, определяющих химический состав системы, достаточно задавать только массовое содержание химических элементов.

Например, рассчитывая параметры равновесия, достигаемого в результате гипотетической реакции  $CO + H_2O$ , состав системы можно определить как:



На панели «Исходный состав системы» в этом случае каждый химический элемент указывается слева в отдельной строке, а его массовое содержание – в правой части панели на том же уровне. В программе предполагается, что задается именно *массовое*

содержание. После ввода этой информации панель исходного состава системы приобретает вид, показанный на Рис.3.

— Исходный состав системы —		
	Химическая формула вещества	Содержание
1	C	12.011
2	O	32
3	H	2.016
4		
5		

Рис.3.

Нормировка массового содержания химических элементов и приведение его к 1 кг или 100% или к единице не требуется. Это будет выполнено программно в ходе расчета.

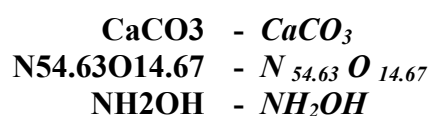
Нетрудно видеть, что в данном случае от пользователя программы потребовался предварительный пересчет мольного содержания химических элементов, содержащихся в  $CO$  и  $H_2O$  в массовое содержание. Эта процедура в случае сложных многоэлементных систем может потребовать большого объема подготовительных расчетов. В то же время, эти вычисления легко формализуются. Поэтому в программе TERRA предусмотрена возможность задания в каждой строке панели «Исходный состав системы» не только отдельных химических элементов, но и соединений, образованных ими. В дальнейшем эти соединения в общем случае будут называться *простыми веществами*, из которых изначально состоит исследуемая система. Тот же вариант исходного состава может быть описан так, как это показано на Рис.4.

— Исходный состав системы —		
	Химическая формула вещества	Содержание
1	CO	28.011
2	H2O	18.016
3		
4		
5		

Рис.4.

Формулы простых веществ записываются с использованием символов химических элементов, принятых в периодической системе Д.И.Менделеева, с учетом строчных и прописных букв. Стехиометрические коэффициенты записываются в строку, чтобы облегчить процедуру набора исходных данных. Стехиометрические коэффициенты, равные единице, могут опускаться. Коэффициенты умножения, типа  $Al(OH)_2$ , при записи формул простых веществ не допускаются. Вместо этого в данном случае следует записать  $AlO_2H_2$ . Разрешено использование дробных стехиометрических коэффициентов, например,  $N_{54.63}O_{14.67}$ . Никакие дополнительные признаки фазового или ионного состояния при описании исходного состава системы не допускаются, так как возможность задания простых веществ предусмотрена всего лишь для облегчения задания содержания химических элементов.

Вот несколько примеров допустимой записи формул простых веществ



Количество зарезервированных строк для задания исходного состава системы, равно пятидесяти. Номер строки отображается слева от поля, предназначенного для записи формулы простого вещества, а линейка прокрутки помещена посередине панели ввода исходного состава системы (см. Рис.2). Строки могут заполняться информацией в произвольном порядке. Между заполненными строками могут оставаться пустые.

В процессе проведения массовых расчетов может возникнуть потребность варьировать содержание исходных простых веществ, образующих систему. Такая возможность предусмотрена в программе TERRA, начиная с редакции 3.6.

Массовые части веществ могут быть заданы списком, в котором каждое значение отделено от последующего запятой. Количество элементов в списке каждого из веществ должно быть одинаково. При проведении расчетов с вариацией состава молярное содержание элементов вначале определяется по первым значениям содержания всех веществ, затем – по вторым и т.д.

	<i>Химическая формула вещества</i>	<i>Содержание</i>
1	CH4[-4650.1,2.225]	1, 2, 3, 4
2	N54.63014.67[0.1.012]	5, 4, 3, 2
3	N2	0.1, 0.1, 0.1, 0.1

В приведенном примере предлагается провести расчеты для четырех вариантов состава.

Допускается задание массового содержания простых веществ путем назначения диапазона значений. Так, тот же вариант исходных данных может быть задан иначе:

	<i>Химическая формула вещества</i>	<i>Содержание</i>
1	CH4[-4650.1,2.225]	1 - 4
2	N54.63014.67[0.1.012]	5 - 2
3	N2	0.1

При задании диапазонов значений массового содержания простых веществ количество расчетных «точек» внутри интервала определяется программно и равно примерно пятидесяти.

В том случае, если расчеты проводятся для ряда составов, одновременно допускается задание вариации только одного параметра состояния (но не более пяти точек), чтобы сохранить возможность построения двумерных графиков состава и параметров состояния.

### 3. База данных простых веществ.

При проведении серийных расчетов, применительно к любой проблемно ориентированной области, зачастую приходится составлять большое число вариантов исходных данных, оперируя примерно одним и тем же набором простых веществ. В программу TERRA для работы с часто применяемыми простыми веществами встроена простая, открытая для расширения база данных.

Для вызова базы данных простых веществ необходимо нажать управляющую кнопку Основного Окна «Вещество». В ответ на это действие будут перекрыты панели

«Параметры равновесия» «Ограничения» и их место окажется занятым новой панелью «Информация о простых веществах (база данных)» (Рис.5).

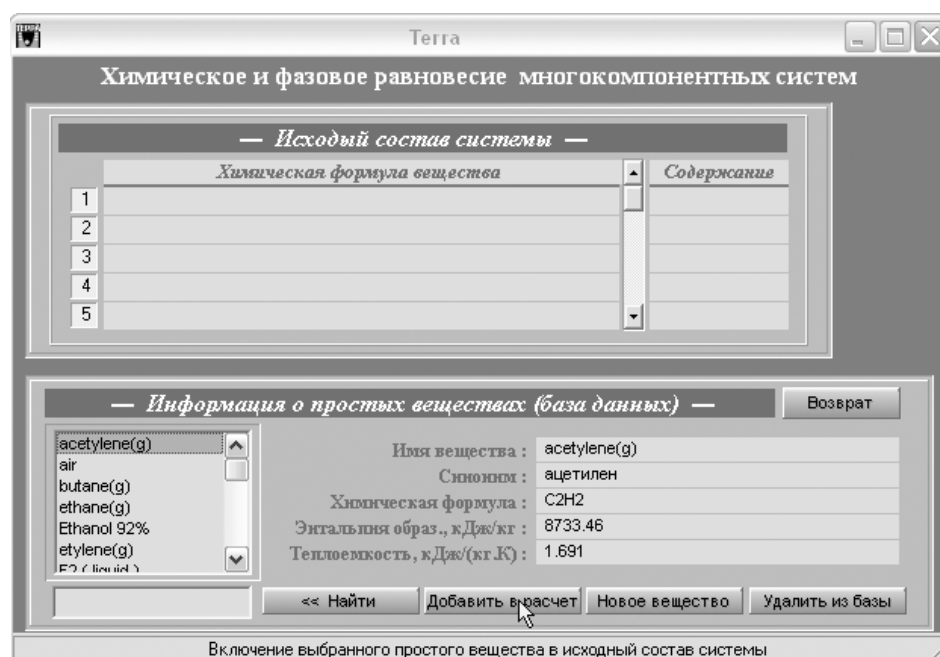


Рис.5.

Левая часть этой панели занята списком тех простых веществ, которые на данный момент уже были занесены в базу. С помощью указателя мыши, линейкой прокрутки или клавишами-стрелками можно найти и выделить любую строчку в предлагаемом списке. Соответственно выбранному веществу, в правой части панели отображаются его свойства:

Имя вещества и синоним – параметры, используемые для идентификации и поиска; химическая формула – строка, сформированная для последующего включения в исходные данные расчета равновесия; энтальпия образования и теплоемкость – физико-химические свойства простого вещества.

Поиск вещества в базе может также производиться по одной или нескольким буквам, входящим в имя вещества. Для этого нужные символы (поисковый образ) набираются в поле редактирования в левом нижнем углу панели (см. Рис.5) после чего следует нажать управляющую клавишу «<< Найти».

Нажатие управляющей кнопки «Добавить в расчет» вносит выбранное простое вещество в состав исходных данных, после чего закрывает панель «Информация о простых веществах (база данных)» и возвращает на старое место панели «Параметры равновесия» и «Особые условия» (Рис.6). Курсор при этом устанавливается в позицию, удобную для занесения содержания этого вещества в базу данных.

— Исходный состав системы —		
	Химическая формула вещества	Содержание
1	CO	28.011
2	H2O	18.016
3	C2H2 [ 8733.46 , 1.691 ]	1 моль = 26.04 г
4		
5		

1-й параметр: температура

2-й параметр: давление

T, K значение

p, МПа значение

Особые условия:

- ☐ Исключить вещества из списка
- ☐ Задать набор инд. веществ
- ☐ Фиксировать концентрации
- ☐ Задать состав конд. растворов
- ☐ Задать инертные вещества
- ☐ Двухкомпонентное топливо
- ☐ Адиабатическое расширение

Рис.6.

Как уже упоминалось выше, база данных простых веществ открыта для расширения. Это означает, что любой пользователь может удалять из нее любые записи и вносить новые. Для удаления записи о простом веществе необходимо найти его имя в списке базы данных, а затем нажать управляющую кнопку с надписью «Удалить из базы» (см. Рис.5).

При попытке удаления какой-либо информации из базы данных простых веществ, в пределах Основного Окна программы возникает новое окно, запрашивающее подтверждение удаления

**Внимание!**

Вы действительно хотите удалить из базы данных вещество ethane(g) ?

Да Нет

Рис.7.

Для пополнения базы данных необходимо нажать управляющую кнопку с надписью «Новое вещество» (см. Рис.5). После этого поля для размещения данных очистятся, и курсор остановится в строке ввода имени простого вещества. Обязательными для заполнения являются имя индивидуального вещества и химическая формула.

— Информация о простых веществах (база данных) —

acetylene(g)  
air  
butane(g)  
ethane(g)  
ethylene(g)  
methane(g)  
Nitrogen

Имя вещества :  
Синоним :  
Химическая формула :  
Энтальпия образ., кДж/кг :  
Теплоемкость, кДж/(кг·К) :

OK Отмена

Рис.8.

Имя вещества и его синоним могут задаваться произвольным образом, а химическая формула подвергается программной проверке на смысловую допустимость. После завершения ввода, для подтверждения записи в базу данных, достаточно нажать клавишу «ОК», а для возврата в основное окно – клавишу «Отмена».

Закрытие панели «Информация о простых веществах (база данных)» (Рис.5). производится либо в результате добавления простого вещества в исходные данные, либо путем нажатия клавиши «Возврат» (в правом верхнем углу панели с информацией о простых веществах, Рис.5). Необходимо отметить, что пока панель с информацией о простых веществах активна, все остальные управляющие элементы удалены с Основного Окна и не могут быть задействованы. В том числе недоступна и клавиша завершения работы программы TERRA.

#### 4. Задание параметров равновесия

Как известно, равновесное состояние любой закрытой и изолированной термодинамической системы однозначно определяется значениями двух параметров состояния. В ходе решения многих практических задач было найдено, что в качестве таких характеристик достаточно рассматривать любые две из следующих шести термодинамических величин.

- давление, МПа
- температура, К
- удельный объем, м<sup>3</sup>/кг
- энтропия, кДж/(кг.К)
- полная энтальпия, кДж/кг
- полная внутренняя энергия, кДж/кг

Поименный перебор определяющих термодинамических параметров выполняется путем последовательного нажатия кнопок со стилизованной стрелкой-треугольником на панели «Параметры равновесия» (Рис.9). При этом шаг за шагом происходит перебор названий параметра. Для выбранных параметров в полях ввода должны быть назначены соответствующие значения с соблюдением указанных размерностей.

В качестве численных значений параметров могут быть заданы одиночные величины, тогда расчет состава и свойств системы будет выполнен в одной «точке». Возможно также задание списка значений или диапазона изменения параметра. В случае задания списка значения элементов должны разделяться запятыми. При задании диапазона изменения значений параметра между минимальным и максимальным пределом изменения параметра должен быть указан дефис или косая черта (например, 1000-3000 или 1000/3000). Сами значения могут заключаться в скобки, что просто необходимо, если назначаемая величина отрицательна (например, (-320)-(-120) ).



Рис.9.

Если шаг изменения параметра явно не задан, тогда он автоматически выбирается так, чтобы все промежуточные величины имели округленные значения, а количество расчетных значений параметра не превышало ста. При выборе в качестве параметра температуры, минимально возможный шаг составляет один градус.

Существует возможность принудительно назначить шаг изменения параметра. Для этого в строке редактирования помимо минимального и максимального значения параметра нужно задать третье число — шаг. Оно должно отделяться от предшествующей информации знаком минус (дефис) или косой чертой. Например, 10-50-2 (или 10-50/2); такая запись предполагает, что расчет будет проводиться при значениях параметра 10, 12, 14,...50. При назначении очень «мелкого» шага цепочка значений параметра будет ограничена ста величинами, начиная от минимальной.

Диапазон изменения может быть назначен и для первого, и для второго параметра и для обоих одновременно. В последнем случае интервал изменения второго параметра (независимо от того, задан или не задан шаг) автоматически будет разбит на четыре равномерных отрезка (пять точек), что делается для удобства последующего представления результатов.

## 5. Вычисление полной энтальпии (внутренней энергии) системы.

При необходимости выполнить моделирование состояния, соответствующего завершению адиабатического превращения при заданном давлении или объеме, в качестве задаваемых параметров состояния выступают (энтальпия и давление) или (внутренняя энергия и удельный объем). Полная энтальпия и полная внутренняя энергия являются аддитивными функциями, поэтому они могут быть вычислены как сумма вкладов всех простых веществ, образующих систему.

При стандартной температуре 298.15 К полная энтальпия и полная внутренняя энергия простого вещества численно равны его энтальпии образования.

Эти значения могут быть заданы в исходных данных вместе с удельной теплоемкостью непосредственно после химической формулы простого вещества в квадратных скобках.

Например: C 71.518 H 139.895 [ -1958, 1.92 ]  
C3H8 [ -2355, 1.669 ]

Первое численное значение в квадратных скобках относится к энтальпии образования, кДж/кг, а второе к удельной теплоемкости простого вещества при стандартной температуре, кДж/(кг.К). В общем случае указание этих физико-химических величин является необязательным. Возможно задание только энтальпии образования без указания значения теплоемкости.

Однако, если энтальпия образования задана для всех простых веществ, включенных в состав системы, и в качестве одного из равновесных параметров состояния выбрана энтальпия или внутренняя энергия системы, то это значение вычисляется программным путем и автоматически помещается в поле параметра. Пример такой ситуации приведен на Рис.10.

**Химическое и фазовое равновесие многокомпонентных систем**

— Исходный состав системы —

	Химическая формула вещества	Содержание
1	C2H2 [ 8733.46 , 1.691 ]	1.0000
2	O2[ 0 ]	3.0723
3		
4		
5		

— Параметры равновесия —

1-й параметр: энтальпия

2-й параметр: давление

$I$ , кДж/кг: 2144.601

$p$ , МПа: 0.1

— Особые условия —

- ☐ Исключить вещества из списка
- ☐ Задать набор инд. веществ
- ☐ Фиксировать концентрации
- ☐ Задать состав конд. растворов
- ☐ Задать инертные вещества
- ☐ Двухкомпонентное топливо
- ☐ Адиабатическое расширение

Перебор типов второго задаваемого параметра

Рис.10.

Следует особо отметить, что вычисленное таким образом значение энтальпии соответствует начальной температуре всей системы (и каждого простого вещества в отдельности) равной 298.15 K.

Существует возможность рассмотреть случай, когда начальная температура одного или нескольких простых веществ отличается от стандартной. Тогда к энтальпии образования должна быть прибавлена величина  $C_p \cdot (T - 298.15)$ . Чтобы ввести эту добавку, необходимо сообщить информацию об удельной теплоемкости и о температуре простого вещества. Удельная теплоемкость заносится в квадратные скобки через запятую после энтальпии образования, как было показано выше, а температура вещества должна задаваться в квадратных скобках после числового значения, определяющего содержание вещества. Температура задается в Кельвинах. Пример такого варианта задания исходных данных приведен на Рис.11.

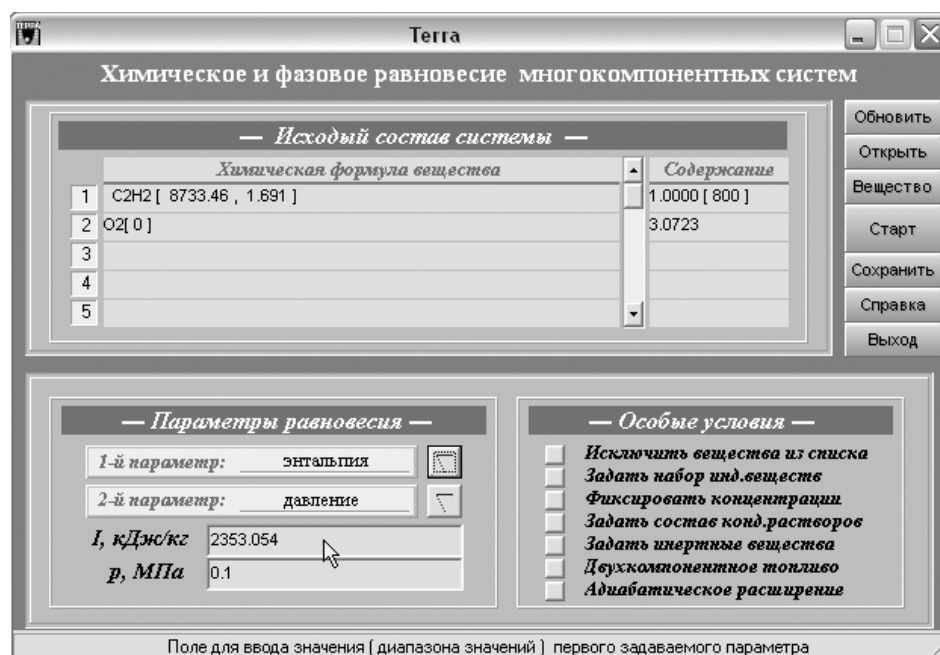


Рис.11.

#### 6. Ограничение списка индивидуальных веществ, рассматриваемых при проведении расчетов.

В ряде случаев, в ходе моделирования, у пользователя может возникнуть потребность самостоятельно скорректировать тот список индивидуальных веществ, который должен быть принят при проведении расчета данного варианта (конечно, из множества веществ, занесенных в базу данных). Для этого реализованы два возможных способа:

- поименно исключить из расчета любые вещества, выбранные из базы данных;
- поименно включить в расчет требуемые соединения.

а) для поименного исключения из расчета любых веществ по желанию пользователя необходимо на панели «Особые условия» отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку с надписью «Исключить вещества из списка». В результате, слева от панели «Особые условия» появится новая панель со списком тех индивидуальных веществ, которые окажутся выбранными из базы данных для предварительно сформированного списка индивидуальных веществ, которые могут входить в равновесный химический состав системы (Рис.12)

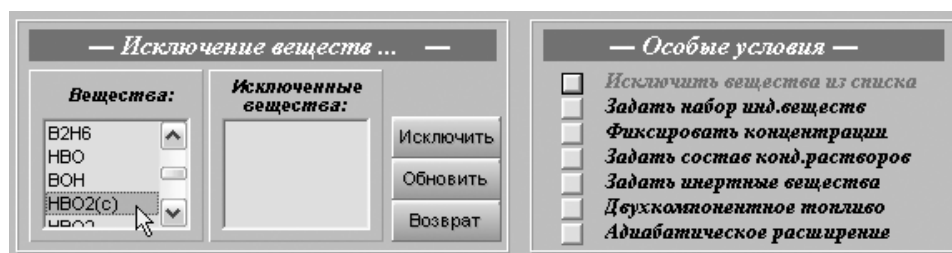


Рис.12.

Необходимо отметить, что кнопка с надписью «Исключить вещества из списка» остается неактивной, если не задан химический состав системы.

После появления на экране панели «Исключение веществ ...» становится возможным выполнить процедуру выбора исключаемых веществ двумя способами: 1) мышью «перетаскивать» вещества из левого окна в правое окно по одному, создавая новый список исключаемых веществ или 2) отмечать исключаемое вещество курсором, а затем нажимать клавишу «Исключить».

Клавиша «Обновить» отменяет все ранее выполненные действия по созданию списка исключаемых веществ и восстанавливает исходный список веществ в левом окне панели. Возврат выбранных для исключения веществ может быть также выполнен путем обратного «перетаскивания» мышью веществ справа налево.

После завершения всех действий по созданию списка исключаемых веществ необходимо закрыть панель «Исключение веществ ...» для чего следует нажать клавишу «Возврат» (Рис.12). В процессе исключения веществ, все управляющие клавиши Основного Окна оставались невидимыми и неактивными. После закрытия панели эти клавиши восстанавливаются.

б) В тех случаях, когда задачей моделирования является изучение частичных равновесий, процедура *выбора* веществ из списка может оказаться более удобной, чем процедура *исключения*, описанная выше.

Для поименного включения в расчет любых веществ по желанию пользователя необходимо на панели «Особые условия» отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку с надписью «Задать набор инд. веществ». В результате, слева от панели «Особые условия» появится новая панель со списком тех индивидуальных веществ, которые окажутся выбранными из базы данных для предварительно сформированного химического состава системы (Рис.13)

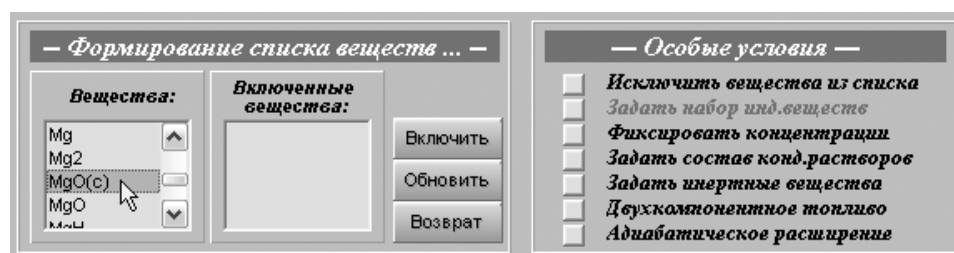


Рис.13.

Последовательно захватывая мышью и перенося вещества из левого окна в правое, формируется новый список веществ, который будет приниматься во внимание во время расчета варианта. Все средства создания нового списка включенных веществ аналогичны тем, что были описаны выше в связи с созданием списка исключаемых веществ.

## 7. Учет возможной частичной неравновесности исследуемой системы.

При моделировании реальных процессов и состояний могут отмечаться отклонения от равновесного состояния. В частности, за счет относительно медленных химических реакций возможно отличие концентраций ряда индивидуальных веществ от равновесных значений. Если считать, что в остальной части системы при этом наблюдается полное химическое равновесие, то такой расчет может приблизить результаты моделирования к условиям наблюдения.

В программе предусмотрены два варианта задания условий неполного равновесия:

- непосредственное задание концентраций ряда веществ;
- задание содержания «инертной» (не реагирующей) части веществ в конденсированном состоянии.

а) для задания фиксированных (отличающихся от равновесных) концентраций веществ необходимо на панели «Особые условия» отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку с надписью «Фиксировать концентрации». В результате, слева от панели «Особые условия» появится новая панель со списком выбранных из базы данных индивидуальных веществ, для которых можно назначать фиксированные значения концентраций (Рис.14).

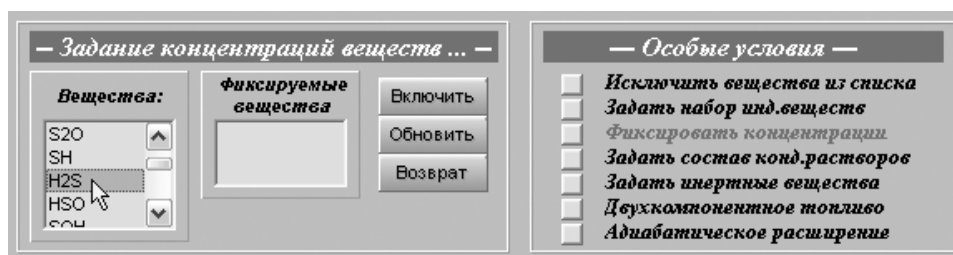


Рис.14.

Выбрав из списка в левом окне панели интересующее вещество, необходимо «перетащить» его в правое окно, либо нажать клавишу «Включить». Как только интересующее вещество появится в окне «Фиксируемые вещества», необходимо назначить для него содержание в системе в размерности моль/кг.



Рис.15.

Для этого в поле редактирования заносится необходимое значение и выполняется клавиша «Назначить». После чего можно либо повторять процедуру задания фиксированных концентраций, либо с помощью клавиши «Возврат» завершить этот этап формирования исходных данных.

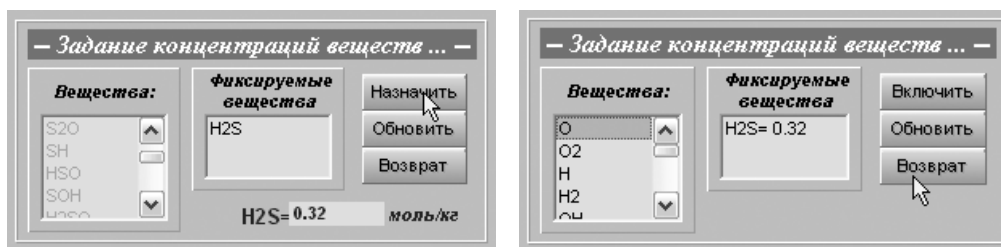


Рис.16.

Количество индивидуальных веществ, для которых может быть заранее назначена концентрация, может достигать пятидесяти. Однако следует с осторожностью пользоваться этой функцией программы, так как всегда существует опасность задания термодинамически не реализуемых состояний. Хотя формальные ошибки, когда общее содержание какого-либо химического элемента в системе меньше, чем его содержится в фиксируемом веществе, отслеживаются самой программой. В этом случае выводится сообщение вида:

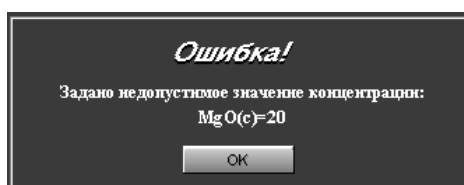


Рис.17.

б) задание содержания «инертных» (не реагирующих) компонентов возможно для индивидуальных веществ в конденсированном состоянии. Такая потребность может возникнуть, например, при моделировании процессов горения, когда экспериментально обнаруживается, что часть исходных индивидуальных веществ просто остается не сгоревшей (не вступившей в реакцию).

Для задания доли «инертных» веществ необходимо на панели «Особые условия» отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку с надписью «Задать инертные вещества». В результате, слева от панели «Особые условия» появится новая панель со списком выбранных из базы данных конденсированных индивидуальных веществ, для которых можно назначать инертные компоненты (Рис.18).

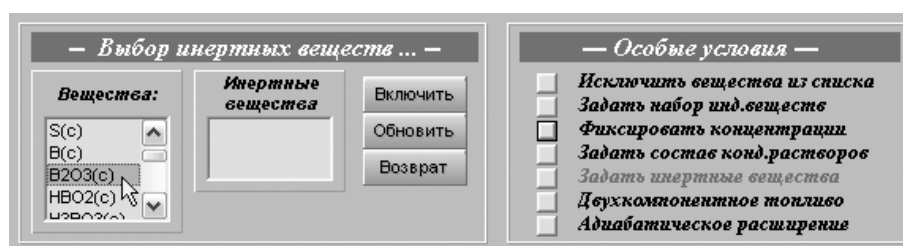


Рис.18.

Процедура назначения содержания инертных веществ подобна описанной выше для назначения фиксированных концентраций. Единственное отличие заключается в том, что инертные вещества дополнительно включаются в список ожидаемых компонентов и могут быть идентифицированы с помощью индекса (i), который добавляется к химической формуле. Например:  $\text{MgO}(i)$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3(i)$ .



Рис.19.

## 8. Расчет параметров равновесных состояний систем с использованием модели конденсированных растворов.

Для задания состава и свойств растворов предусмотрена дополнительная опция. На панели «Особые условия» необходимо выбрать и активировать кнопку «Задать состав конд.растворов» (Рис.20). После включения в исходные данные сведений о конденсированных растворах эта строчка изменяет цвет с черного на бирюзовый. Возможность назначения конденсированных растворов не уменьшает прежних функциональных возможностей программной системы. Пока не назначен список веществ ожидаемых конденсированных растворов и не определены парциальные избыточные энтальпии их компонентов, в программной системе все индивидуальные вещества в конденсированном состоянии полагаются однокомпонентными несмешивающимися фазами.

Нажатие кнопки «Задать состав конд.растворов» приводит к изменению содержания левой нижней панели основного окна программы.

На месте панели «Параметры равновесия» появляется новая панель с названием: «Задание состава и свойств раствора»

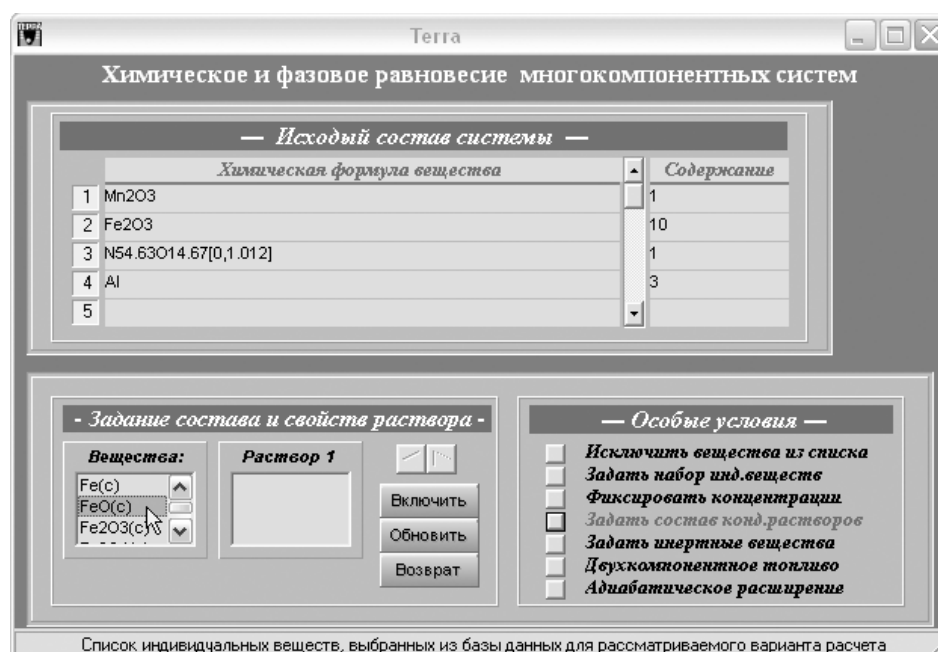


Рис.20.

Слева размещается автоматически формируемый список конденсированных веществ, образованных из элементов, входящих в состав исследуемой системы (таблица «Вещества»). Содержание таблицы «Раствор №» формируется пользователем, который включает в нее те индивидуальные вещества, которые по его представлениям должны входить в состав раствора. Включение выбранного вещества осуществляется либо путем нажатия на кнопку «Включить», либо перетаскиванием имени вещества из левой таблицы в правую.

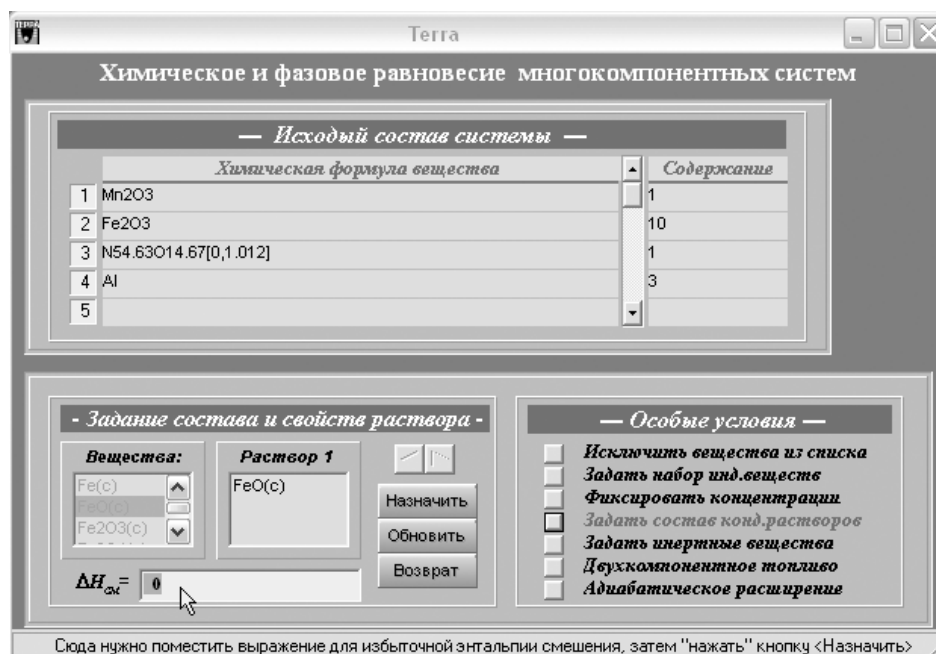


Рис.21.

Немедленно после появления формулы индивидуального вещества в составе правой таблицы, на панели задания состава и свойств раствора появляется поле редактирования, в котором требуется задать парциальную избыточную энтальпию смешения индивидуального вещества (см. Рис.21). При этом кнопка «Включить» переименовывается и получает надпись «Назначить».

В поле редактирования предлагается набрать арифметическое выражение, которое в программе будет использовано для вычисления избыточной энтальпии смешения компонента. В частном случае это может быть числовая константа. Если задать нулевое значение, то это будет предполагать модель идеального раствора.

Для моделирования с использованием более сложных моделей конденсированных растворов (строгорегулярные, квазирегулярные, субрегулярные и другие модели) в качестве  $\Delta H_{см}$  может назначаться выражение, зависящее от мольной доли компонента в растворе и температуры. Вводимое алгебраическое выражение может содержать числовые константы (целая часть от дробной должны отделяться десятичной точкой), знаки арифметических операций (+, -, \*, /, ^), круглые скобки и основные математические функции, у которых аргумент должен быть заключен в круглые скобки (sin, cos, ln, lg, exp, abs, sqrt). Размерность избыточной энтальпии предполагается Дж/моль. В состав арифметического выражения может быть включена температура (T) и мольная доля компонента раствора (x). Например:  $(1414.19 + 1.125 \cdot T) \cdot (1-x)^2$ . (см. Рис.22).



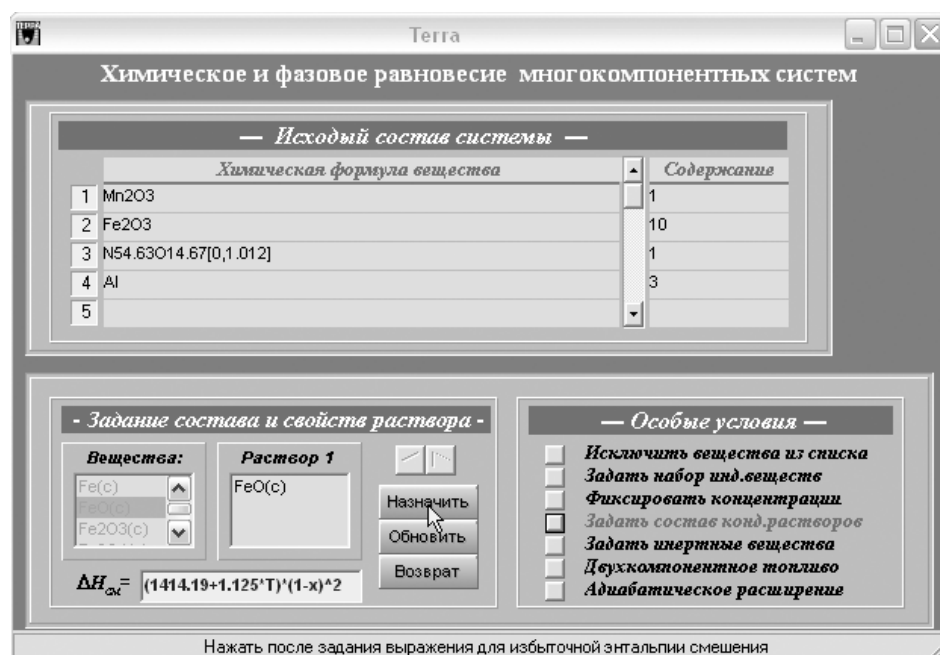


Рис.22.

После формирования состава и свойств первого раствора появляется возможность перейти к заданию свойств следующего раствора. Для этого необходимо нажать кнопку со стрелкой в правом верхнем углу панели «Задание состава и свойств раствора» и продолжить процесс формирования исходных данных для следующего раствора.

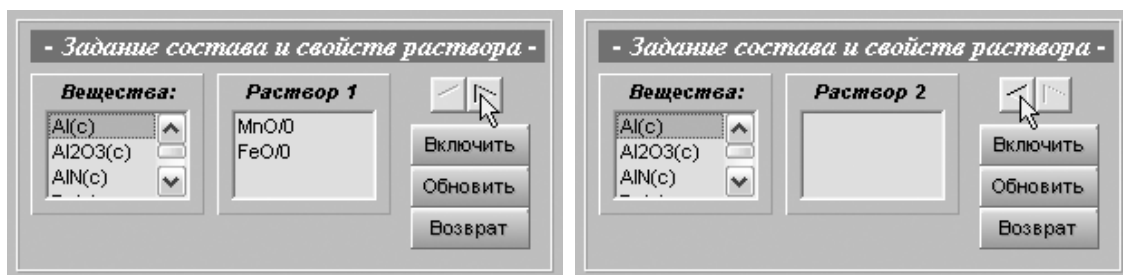


Рис.23.

После задания состава и свойств растворов осуществляется возврат к режиму ввода условий равновесия и запуска программы на выполнение.

После завершения расчета в списках равновесных концентраций компоненты конденсированных растворов отмечаются символами (s1), (s2), и т.д., где цифра – номер раствора. В качестве примера на Рис.24 показан образец вывода состава после завершения расчета с использованием модели конденсированных растворов.

Компонент	моль/кг
Al2O2	0
Al2O3(c)	3.7062
Al2O3	0
AlN(c)	0
AlN	0
Fe(s2)	5.5513
Fe	0.2849 · 10 <sup>-6</sup>
FeO(s1)	2.7822
FeO	0.9215 · 10 <sup>-10</sup>
FeO2	0.1225 · 10 <sup>-13</sup>
Fe2O3(s1)	0.00798
Fe3O4(c)	0

Рис.24.

### 8. Задание содержания химических элементов в системе для двухкомпонентных топлив.

Одна из распространенных задач, которая может быть решена на основе применения модели термодинамического равновесия, это рассмотрение фазовых и химических превращений двухкомпонентных топлив при разных степенях отклонения от стехиометрического соотношения. В ряде случаев и окислитель и горючее сами по себе могут представлять смеси простых веществ. Тогда процедура определения стехиометрического соотношения компонентов и расчет мольного содержания химических элементов становятся весьма трудоемкими.

Для решения этой подготовительной задачи на панели «Особые условия» необходимо отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку с надписью «Двухкомпонентное топливо». В результате, слева от панели «Особые условия» появится новая панель с окнами для размещения простых веществ, входящих в состав горючего и окислителя (Рис.25).

Исходный состав системы	
Химическая формула вещества	Содержание
1 CH <sub>4</sub>	0.5000
2 O <sub>2</sub>	4
3 N <sub>54.63</sub> O <sub>14.67</sub> [ 0 , 1.012 ]	0.5000
4 C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> [ -2355 , 1.669 ]	0.5000
5	

Выбор горючего и окислителя...

Окислитель: O<sub>2</sub>, N<sub>54.63</sub>O<sub>14.67</sub>

Горючее: CH<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

k(o)=4.1627    alpha =

Особые условия

☐ Исключить вещества из списка

☐ Задать набор инд. веществ

☐ Фиксировать концентрации

☐ Задать состав конд. растворов

☐ Задать инертные вещества

☐ Двухкомпонентное топливо

☐ Адиабатическое расширение

Рис.25.

На основании информации, извлекаемой из панели «Исходный состав системы», для всех заданных простых веществ вычисляется алгебраическая сумма валентностей химических элементов, что дает возможность сразу разделить вещества на две группы - горючие и окислители, а затем вычислить для них теоретически необходимое (стехиометрическое) соотношение  $k(o)$ . (Сумма валентностей для окислителей отрицательна, а для горючих положительна). Если в исходном составе всего два вещества, то их содержание в панели «Исходный состав системы» может вообще не задаваться. А в том случае, когда окислитель и (или) горючее образованы несколькими веществами, требуется задать соотношение между ними. На Рис.21 кислород и воздух, образующие окислитель, взяты в соотношении 4 : 0.5, а CH<sub>4</sub> и C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> в соотношении 0.5 : 0.5.

Если информация об относительном содержании веществ в составном горячем или окислителе будет отсутствовать, то программа выдаст соответствующее оповещение.

Простые вещества могут быть перемещены из окна горючего в окно окислителя и наоборот с помощью мыши или нажатием на клавишу «Переместить». Если в

процессе перемещения «вручную» композиция потеряет свойства двухкомпонентного топлива (сумма валентностей окислителя станет положительной или сумма валентностей горючего – отрицательной), то на панели «Выбор горючего и окислителя» перестанет отображаться стехиометрическое соотношение  $k(o)$  и поле для ввода коэффициента избытка окислителя (см. Рис.26). Нажатие на клавишу «Возврат» приводит к восстановлению исходного содержимого панели «Параметры равновесия».

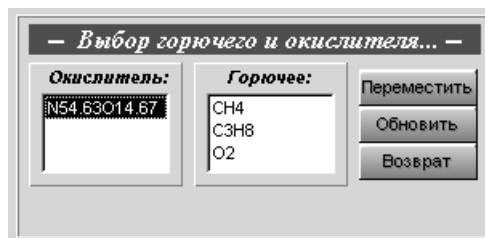


Рис.26.

Если значение стехиометрического соотношения отображается на панели «Выбор горючего и окислителя» (Рис.25), то следующим шагом может быть задано одиночное значение коэффициента избытка окислителя, ряд значений, разделенных запятыми, или интервал значений.

Например: *1.1* или *1.0, 1.1, 1.2, 1.3* или *1.0 – 1.3* или *1.0 – 1.3 – 0.1*.

После нажатия на клавишу «Возврат» значения содержания простых веществ на панели «Параметры равновесия» изменяются после пересчета в соответствии с назначенными значениями коэффициента избытка окислителя

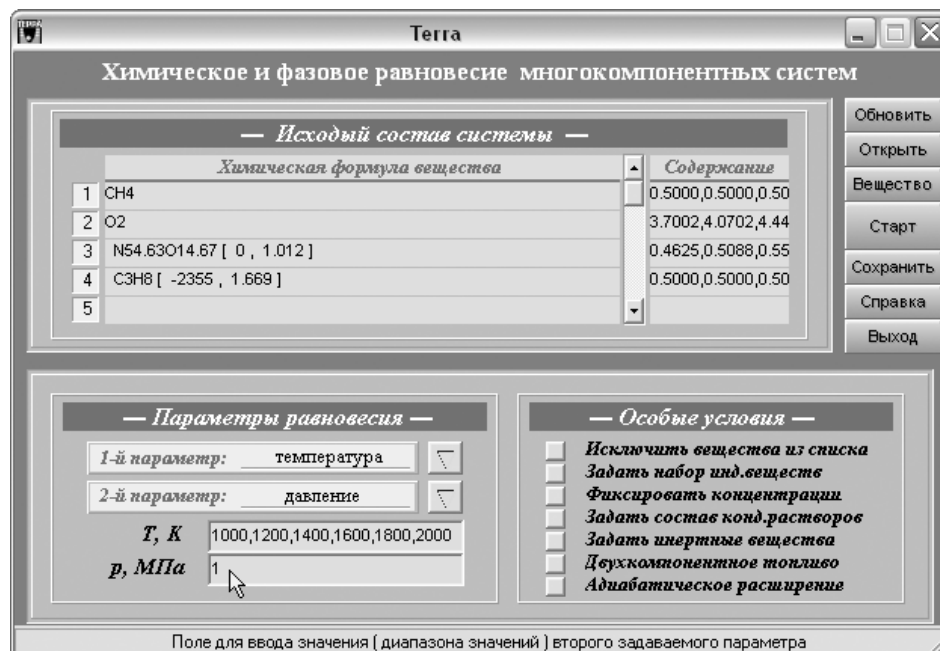


Рис.27.

## 9. Расчет параметров адиабатического расширения в сопле.

В программе TERRA предусмотрена специальная возможность задания исходных данных и вычисления параметров процесса одномерного адиабатического расширения

в сопле. Чтобы воспользоваться этой возможностью, следует выбрать режим «Адиабатическое расширение» на панели «Исходный состав системы». После этого панель «Параметры равновесия» будет заменена на новую панель «Параметры камеры и сопла» (Рис.28).

Рис.28

В соответствии с существующими традициями организации расчета параметров расширения в сопле, одним из задаваемых параметров равновесия всегда является давление в камере (сгорания или нагрева). Вторым параметром может быть выбран любой из пяти ( $T$ ,  $v$ ,  $S$ ,  $I$ ,  $U$ ), хотя чаще всего по постановке задачи выбирается  $I$  или  $T$ . Условия расширения в соответствующем поле редактирования (третье сверху на Рис.28) могут быть заданы в виде давления расширения  $p(a)$ , отношения давлений  $p(\text{кам})/p(a)$ , относительного диаметра  $d(a)/d(kp)$  или относительной площади сопла  $S(a)/S(kp)$ .

Для условий расширения (третье сверху поле редактирования на Рис.28) может быть задано одно единственное значение или ряд значений, разделенных запятыми, или диапазон значений через дефис. Условия в критическом сечении сопла рассчитываются всегда. Задаваемый параметр равновесия в камере (второе сверху поле редактирования на Рис.28) также может содержать несколько значений, но не более пяти. Вариации по составу рабочего тела (по коэффициенту избытка окислителя) в этом случае не предусмотрены.

Программа TERRA позволяет проводить расчеты по любой из трех моделей: равновесное расширение, замороженное (от критического сечения) расширение и замороженное расширение от сечения с заданной температурой. Необходимый режим выбирается путем последовательного нажатия на кнопку с изображением стилизованной стрелки в нижней части панели «Параметры камеры и сопла». При выборе модели замороженного расширения от сечения с заданной температурой, на панели дополнительно отображается поле редактирования для ввода значения температуры ступенчатого «замораживания» состава.

Рис.29

В результате расчета равновесного состава фаз при расширении в сопле программа TERRA позволяет получить значения специфических характеристик процесса:

- средний показатель процесса расширения,
- скорость истечения,
- число Маха,
- относительная площадь сопла,
- удельная площадь сопла,
- удельный импульс в пустоте,
- расходный комплекс.

Эти характеристики выводятся на экран, отображаются в виде графиков, сохраняются в виде файлов и выводятся на печать вместе с остальными параметрами равновесных состояний.

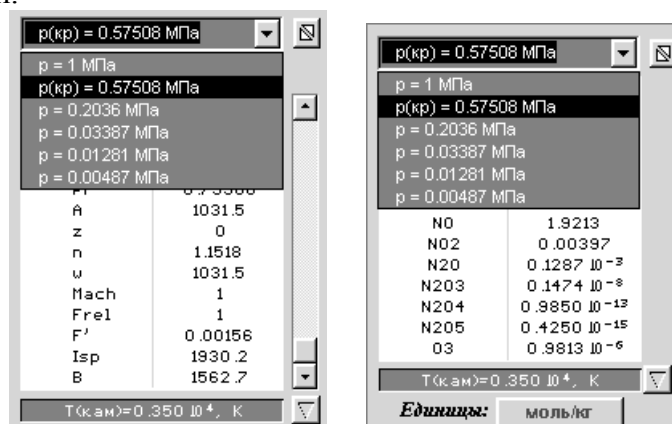


Рис.30.

#### 10. Сохранение исходных данных варианта в файле.

Подготовленные исходные данные любого варианта могут быть сохранены на диске для последующего восстановления. Чтобы записать исходные данные варианта в файл, необходимо нажать управляющую клавишу «Сохранить». В результате, поверх Основного Окна программы появится стандартная форма, принятая в операционной системе WINDOWS (Рис.31).

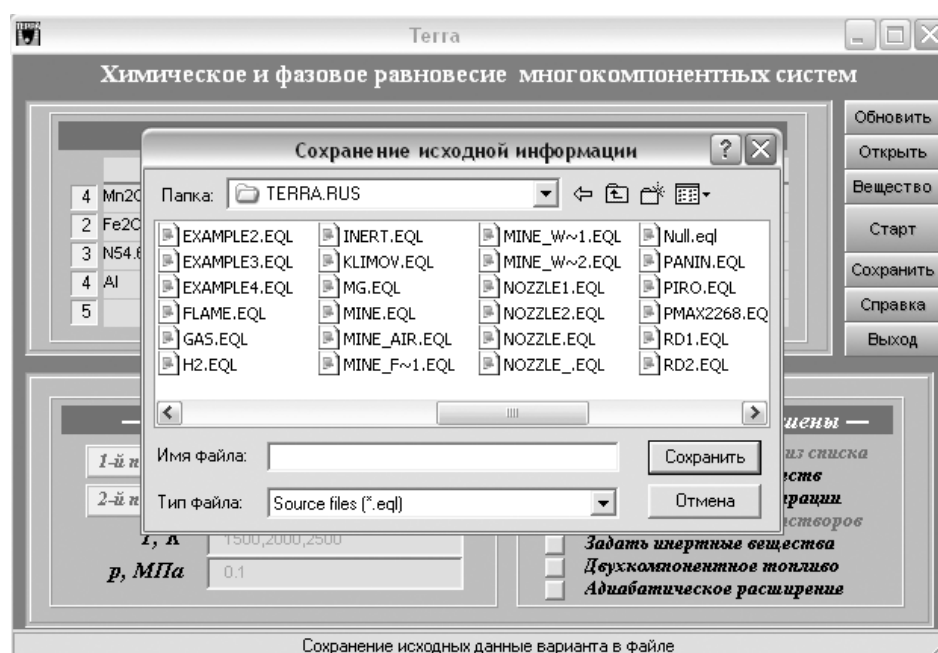


Рис.31.

Файлы исходных данных по умолчанию имеют расширение **.eq1** (equilibrium). Это расширение при назначении имени сохраняемого файла можно не указывать, оно будет автоматически присоединено к набранной комбинации символов. Сохранение файла с исходными данными возможно в любом доступном каталоге. Сохранение информации в уже существующем файле приведет к потере предыдущего содержимого.

После выбора имени диска и каталога, а также после назначения имени файла должна быть нажата клавиша «Сохранить», чтобы исходные данные были отправлены на долговременное хранение. Для отмены записи должна быть нажата клавиша «Отмена».

Создаваемый файл с исходными данными является обычным текстовым файлом, который можно читать и редактировать с помощью любых текстовых процессоров (MSWord, WordPad, Блокнот и др.). Вот пример содержимого такого файла:

```
Ion: no
Cond: yes
Exhaust: no
Subst1: C1 - 20.231
Subst2: H1 - 1.974
Subst3: S1 - 2.632
Subst4: Na - 0.1166
Subst5: Cl - 0.0716
Subst6: N1 - 2.982
Subst7: Cu - 0.133
Subst8: O1 - 18.856
Subst9: H2O1 - 23.795
Subst10: Mg30.35Al8.99C0.72H1.15K0.098N0.098O0.3 - 16.66
Subst11: N53.918O14.486Ar0.32242C0.0109 - 460
Subst12: Si1 - 12.55
Par1: T= 1800,1500,1200,900 K
Par2: p= 0.1 МПа
```

Двоеточие отделяет ключевые слова от содержательной информации. Пробелы не являются смысловыми символами. Ниже дается пояснение, какой смысл имеет каждое из зарезервированных ключевых слов.

**Ion** – состояние выключателя, определяющего необходимость исключения из расчета ионизированных веществ; параметр может принимать значения **yes** или **no**.

**Cond** - состояние выключателя, определяющего необходимость исключения из расчета конденсированных веществ; параметр может принимать значения **yes** или **no**.

**Exhaust** – переключатель, принимающий значение **no**, если не предусмотрен расчет параметров расширения в сопле и **yes** - в противном случае.

**Subst##** - содержимое строки **##**, которая задает формулу простого вещества, входящего в состав рабочего тела, и его массовое количество; параметр в точности повторяет содержимое полей редактирования в панели «Исходный состав системы»; дефис разделяет химическую формулу и массовое содержание; количество параметров такого вида может достигать 50, по числу возможных строк редактирования.

**Par1** – наименование и диапазон изменения первого параметра, как они определены в исходных данных; допустимые наименования параметра:  $p=$ ,  $T=$ ,  $v=$ ,  $S=$ ,  $I=$ ,  $U=$

**Par2** – наименование и диапазон изменения второго параметра.

**Del#** - список веществ, исключаемых из рассмотрения при проведении расчета; # - порядковый номер строки в исходных данных, поскольку список исключаемых веществ может быть достаточно представительным.

**Inc#** - список индивидуальных веществ, отобранных для рассмотрения при проведении расчета; # - порядковый номер строки в исходных данных, поскольку список включаемых веществ может быть достаточно представительным.

**Fix#** - список индивидуальных веществ, концентрация которых зафиксирована, и заданное значение концентрации; # - порядковый номер строки в исходных данных.

**Inert#** - список индивидуальных веществ, назначенных как инертные, и соответствующие им значения; # - порядковый номер строки в исходных данных.

**P1cam** – наименование (давление) и значение первого параметра, определяющего условия в камере (для расчета параметров расширения в сопле при Exhaust=yes).

**P2cam** – наименование и диапазон изменения второго параметра, определяющего условия в камере (для расчета параметров расширения в сопле при Exhaust=yes); допустимые наименования параметра:  $T=$ ,  $v=$ ,  $S=$ ,  $I=$ ,  $U=$ .

**Ausg** – условия расширения ( $p(a)$ ,  $p(\text{кам})/p(a)$ ,  $d(a)/d(kp)$  или  $S(a)/S(kp)$ ) и принятые значения

**Model** – обозначение модели расширения (равн., заморозж., равн. до  $T(\text{зам})$ )

**Sol#** – строки с описанием имен и выражений для избыточной энтальпии смешения конденсированных индивидуальных веществ, включаемых растворов; # - порядковый номер конденсированного раствора.

## 11. Открытие файла с исходными данными.

В том случае, если ранее были подготовлены и сохранены файлы с исходными данными одного или нескольких вариантов, существует возможность восстановить содержимое любого из них в соответствующих полях Основного Окна. Для этого необходимо нажать кнопку с надписью «Открыть».

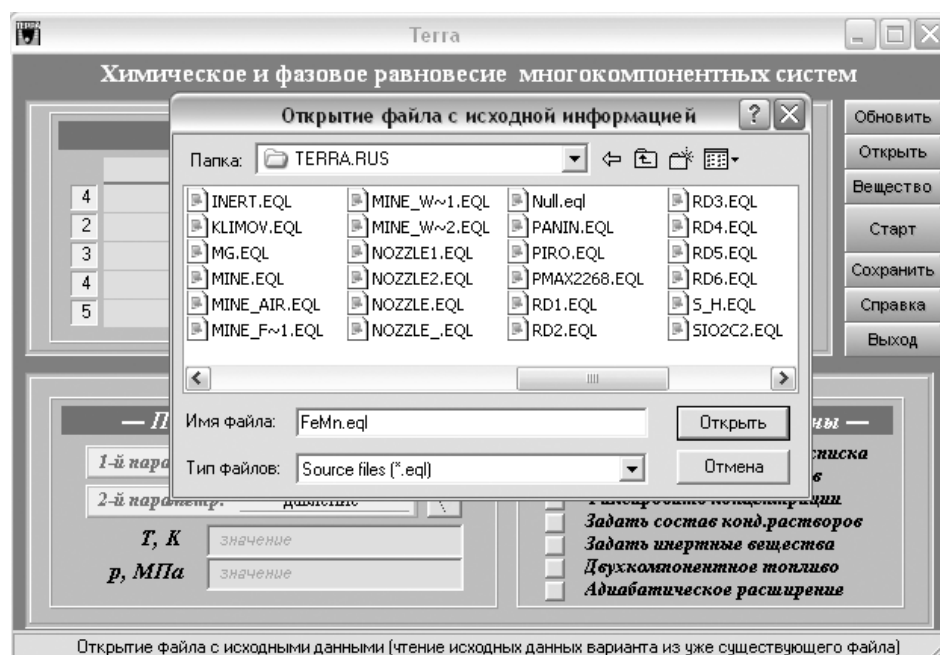


Рис.32.

В ответ, поверх основной формы разместится стандартное окно WINDOWS с заголовком «Открытие файла с исходной информацией» (Рис.32). В поле этого окна будут отображены имена всех файлов с расширением **.eq1** из того каталога, где расположены файлы программного комплекса TERRA. Нужный файл может быть выбран из представленного списка или найден в другом каталоге или на другом диске.

Данные из выбранного файла будут актуализированы во всех видимых на экране и скрытых полях и элементах редактирования. Они могут быть использованы для проведения расчетов без изменения или подвергнуты дополнительной правке.

## 12. Запуск программы на выполнение.

После завершения подготовки исходных данных и, если нужно, запоминания этого варианта может быть осуществлен запуск программы на выполнение. Для этого достаточно нажать кнопку «Старт» (см. Рис.2). Процесс выполнения вычислений отображается на форме Основного Окна путем заполнения светлого прямоугольника в правом нижнем углу стилизованными темными блоками (Рис.33).



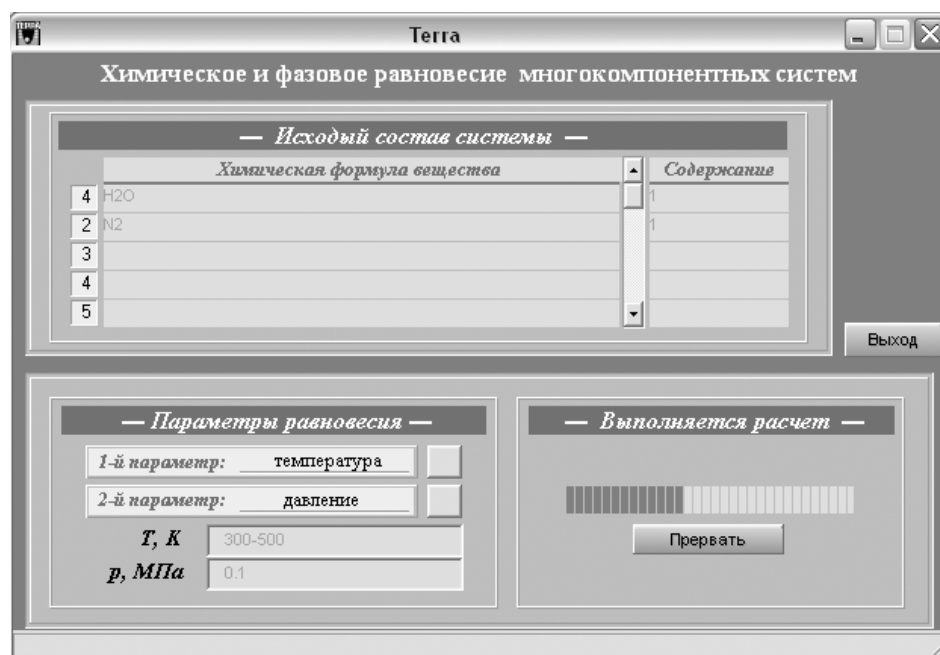


Рис.33.

В любой момент, пока идут вычисления, их можно прекратить, нажав клавишу «Прервать». В результате этого действия Основное Окно программы принимает исходный вид с данными введенного варианта.

После завершения вычислений во всех расчетных точках панель с индикатором меняет заголовок «Выполняется расчет» на «Вычисления завершены». Одновременно в этой панели появляются две кнопки «Изменить данные» и «Результаты».

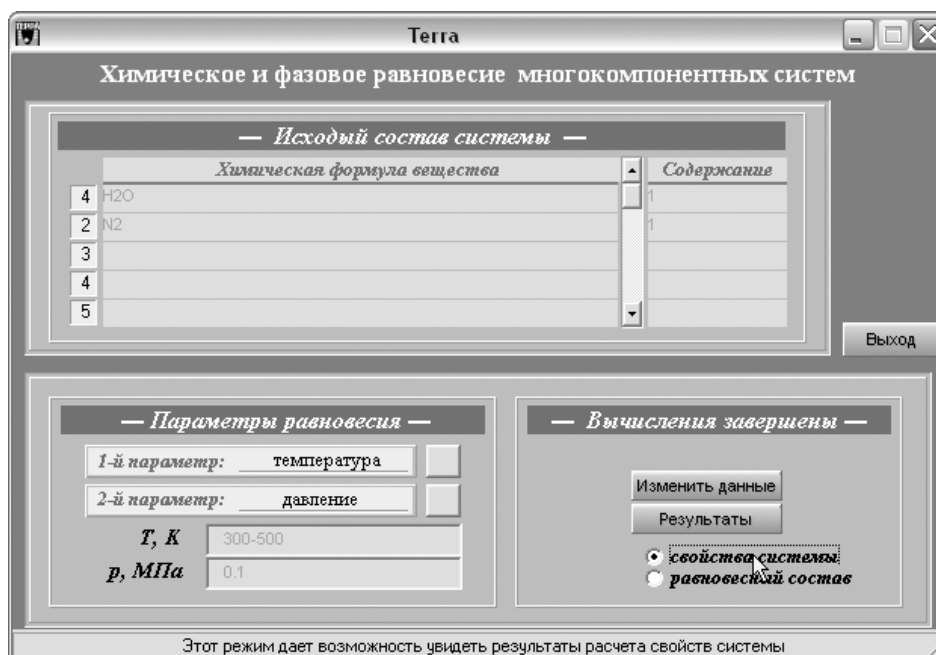


Рис.34

Первая из них позволяет вернуться на шаг назад и продолжить редактирование исходных данных либо перейти к формированию нового задания на расчет.

Нажатие клавиши «Результаты» дает возможность увидеть рассчитанные параметры равновесного состояния и концентрации компонентов фаз. Из-за большого объема полученных данных не удастся отобразить все результирующие сведения в одной выходной форме. Поэтому пользователю тут же предлагается выбрать, что он хочет просмотреть в первую очередь: свойства системы или равновесный состав.

### 13. Представление равновесных свойств системы.

Выбор переключателя с надписью «*свойства системы*» и нажатие клавиши «Результаты» (Рис.34) приводит к возникновению на экране дочернего окна, имеющего вид, показанный на Рис.35.

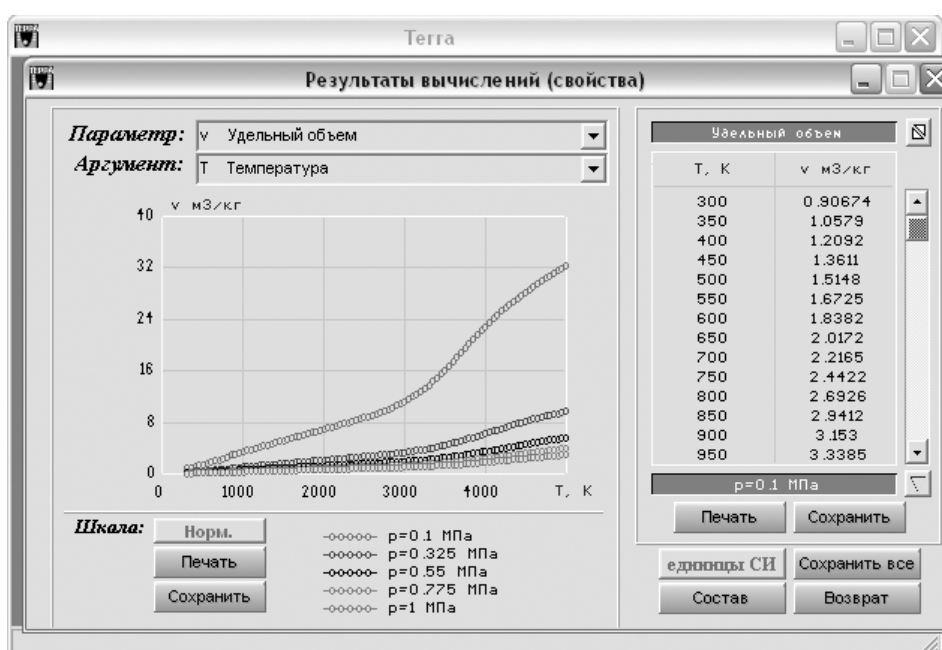


Рис.35

Левая панель этого окна предназначена для графического представления результатов расчетов, а правая - содержит те же данные, но в табличной форме.

В качестве аргумента в момент создания окна выбирается тот параметр равновесия, который в исходных данных задан диапазоном своего изменения. Если же диапазон задан для обоих параметров равновесия, то строится серия кривых, относящихся к пяти значениям второго параметра. Первоначальное значение функции, как правило, - удельный объем. Однако расположенные в верхней части левого окна две строки выбора параметра и аргумента позволяют строить произвольные зависимости, построенные из любых 28 заранее вычисленных значений. На Рис.36 показан пример такого выбора.

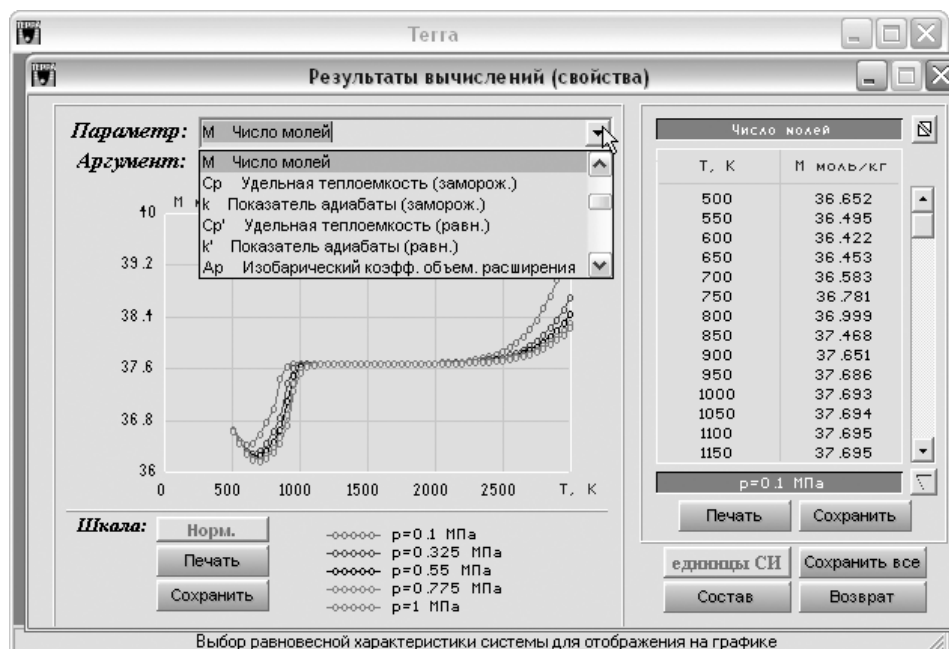


Рис.36

В результате любого расчета определяются значения следующих параметров равновесного состояния:

Имя	Название параметра	СИ	техн.сист.
<b>P</b>	Давление	МПа	атм
<b>T</b>	Температура	К	°С
<b>v</b>	Удельный объем	м <sup>3</sup> /кг	м <sup>3</sup> /кг
<b>S</b>	Энтропия	кДж/(кг.К)	ккал/(кг.К)
<b>I</b>	Полная энтальпия	кДж/кг	ккал/кг
<b>U</b>	Полная внутренняя энергия	кДж/кг	ккал/кг
<b>M</b>	Число молей	моль/кг	моль/кг
<b>Ср</b>	Удельная теплоемкость (замороженная)	кДж/(кг.К)	ккал/(кг.К)
<b>k</b>	Показатель адиабаты (замороженный)	1	1
<b>Ср'</b>	Удельная теплоемкость (равновесная)	кДж/(кг.К)	ккал/(кг.К)
<b>k'</b>	Показатель адиабаты (равновесный)	1	1
<b>Ar</b>	Изобарический коэфф. объемного расширения	1	1
<b>Bv</b>	Изохорический термический коэфф. давления	1	1
<b>Gt</b>	Изотермическая сжимаемость	1	1
<b>MMg</b>	Молярная масса газовой фазы	г/моль	г/моль
<b>Rg</b>	Газовая постоянная	Дж/(кг.К)	кал/(кг.К)
<b>Срг</b>	Теплоемкость газовой фазы (замороженная)	кДж/(кг.К)	ккал/(кг.К)
<b>kg</b>	Показатель адиабаты газовой фазы (заморож.)	1	1
<b>Ср'g</b>	Теплоемкость газовой фазы (равновесная)	кДж/(кг.К)	ккал/(кг.К)
<b>k'g</b>	Показатель адиабаты газовой фазы (равн.)	1	1
<b>Mu</b>	Коэффициент динамической вязкости	Па.с	кг.с/м <sup>2</sup>
<b>Лt</b>	Коэффициент теплопроводности	Вт/(м.К)	кал/(см.с.К)
<b>Лt'</b>	Полный коэффициент теплопроводности	Вт/(м.К)	кал/(см.с.К)
<b>Pr</b>	Число Прандтля (замороженное)	1	1
<b>Pr'</b>	Число Прандтля (равновесное)	1	1
<b>A</b>	Скорость звука	м/с	м/с
<b>n</b>	Показатель процесса расширения	1	1
<b>w</b>	Скорость истечения	м/с	м/с
<b>Mach</b>	Число Маха	1	1

<b>Frel</b>	Относительная площадь сопла	1	1
<b>F'</b>	Удельная площадь сопла	м2.с/кг	м2.с/кг
<b>Isp</b>	Удельный импульс в пустоте	м/с	с
<b>B</b>	Расходный комплекс	м/с	с
<b>z</b>	Массовая доля конденсированных фаз	1	1

Дополнительно предусмотрена возможность задания произвольной функции, определяемой пользователем. В списке параметров эта возможность указана последней строчкой «Выражение, задаваемое пользователем». Выбор этой возможности приводит к появлению строки редактирования, где может быть задана произвольная функция в виде <имя> = <выражение> (Рис.37).

Рис.37

В качестве элементов выражения могут выступать имена упомянутых 28 значений (см. вышеприведенную таблицу), числовые константы, знаки арифметических операций, а также имена элементарных функций:  $\sin()$ ,  $\cos()$ ,  $\text{tg}()$ ,  $\text{ctg}()$ ,  $\ln()$ ,  $\lg()$ ,  $\exp()$ ,  $\arcsin()$ ,  $\arccos()$ ,  $\text{sqrt}()$ ,  $\text{abs}()$ . Арифметические выражения могут строиться по общепринятым правилам, имея в виду, что аргументы элементарных функций записываются в круглых скобках, а для изменения порядка вычислений также используются круглые скобки произвольной степени вложенности.

Нажатие клавиши «OK» приводит к отображению искомого графика с автоматическим выбором шкалы по обоим координатам.

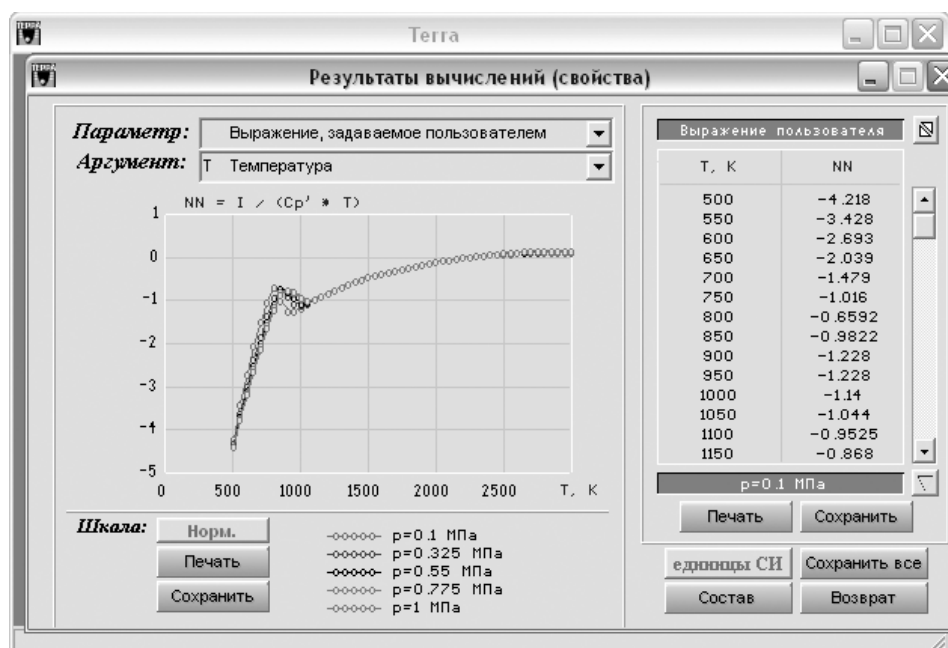


Рис.38

Пользователю предоставлена возможность выбора пропорциональной или логарифмической шкалы отображения результатов по двум координатам. Для этого последовательно нажимается клавиша, рядом с которой помещена надпись «Шкала:». С ее помощью изменяется масштаб представления результатов.

Две ниже расположенные кнопки дают возможность напечатать график, представленный на экране или сохранить его в файле.

Перед печатью графика запрашивается тип принтера, подключенного к компьютеру: цветной или черно-белый. В зависимости от этого при выводе изменяется внешний вид маркеров, поскольку на черно-белом печатающем устройстве тона серого, используемые для рядом расположенных кривых плохо различимы.

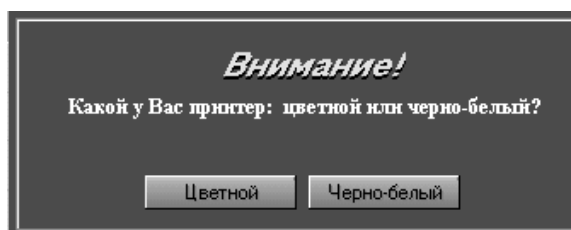


Рис.39

Непосредственно перед печатью на экран выводится стандартная панель настройки принтера, с помощью которой можно, в том числе, регулировать качество выводимого изображения. Наилучшие результаты при непосредственном выводе на печать достигаются при использовании струйных принтеров. Лазерные черно-белые принтеры в ряде случаев дают невысокое качество изображения, особенно при печати координатной сетки, за счет масштабирования. Пример вывода на печать приведен на Рис.40.

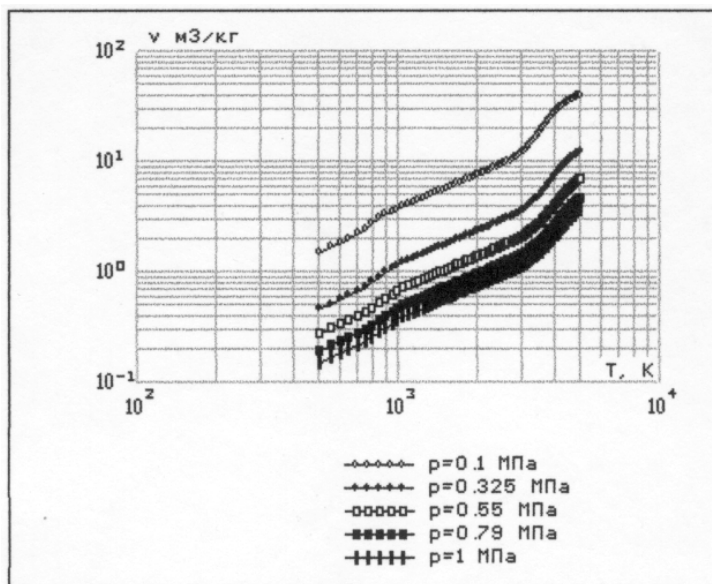


График функции "Удельный объем - Температура"  
для исходного состава: (CO - 1) + (H2O - 1)

Рис.40.

Процедура сохранения графика в файл может быть полезна, когда требуется вставить изображение в какой-либо документ. Файл сохраняется в растровом формате (.bmp), который обрабатывается практически любым текстовым и графическим редактором. Выбор имени файла и каталога для его размещения производится с помощью стандартной для Windows панели сохранения файла (Рис.41)

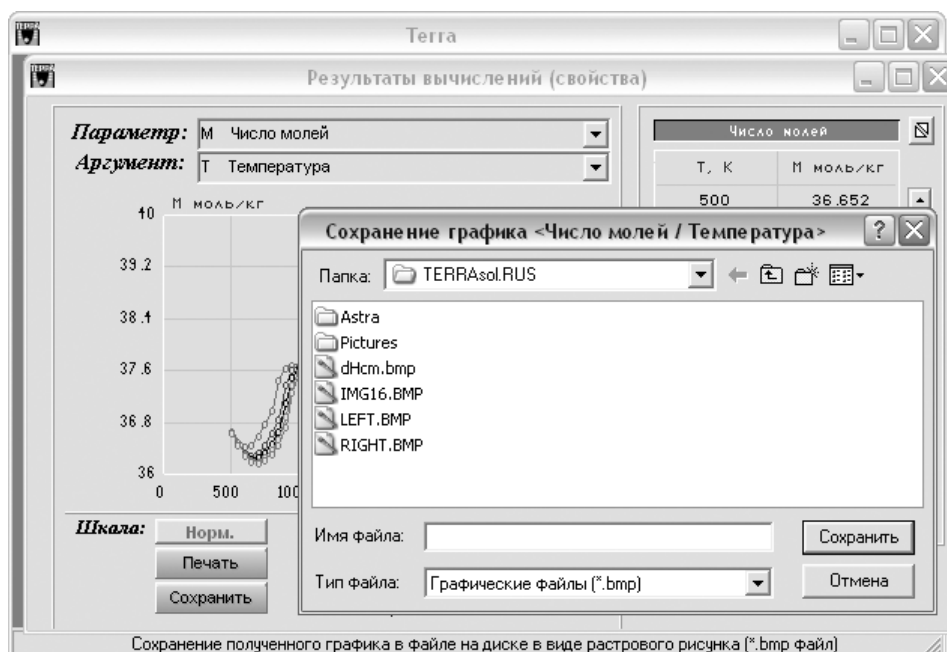


Рис.41

Пример графического изображения, помещаемого в файл, приведен на Рис.42. Сравнение изображения из файла с графиком, создаваемым на экране (Рис.35) показывает, что формат и общий вид чертежей тождественны.

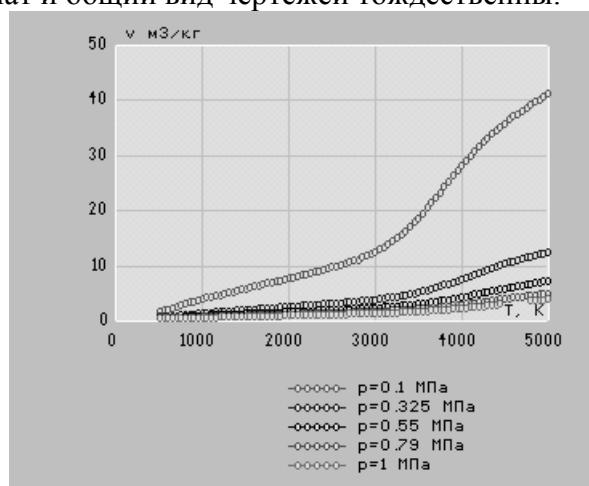


Рис.42

На правой панели окна результатов (см. Рис.35) отображается таблица значений, найденных в результате расчетов. Это те же величины, что используются при построении графика. Тип аргумента и функции в таблице изменяются одновременно с перестроением графика.

Кнопки «Печать» и «Сохранить» позволяют выводить на печатающее устройство и сохранять в файле отображаемые на экране табличные значения. Формат вывода

результатов в файл – текстовый, в кодировке Windows (.txt). На печатающее устройство результаты выводятся в виде таблицы с заголовком. Примеры вывода на печать и в файл приведены на Рис.43 и Рис.44.

Таблица значений равновесных параметров  
"Удельный объем - Температура"  
для исходного состава: (CO - 1) + (H<sub>2</sub>O - 1)

p=0.1 МПа, T=var

Т К	v м3/кг	Т К	v м3/кг	Т К	v м3/кг
500	1.5292	850	3.1142	1200	4.5501
550	1.6899	900	3.3799	1250	4.7397
600	1.8605	950	3.5944	1300	4.9293
650	2.0483	1000	3.7899	1350	5.1189
700	2.2627	1050	3.9808	1400	5.3085
750	2.5141	1100	4.1708	1450	5.4981
800	2.8063	1150	4.3605	1500	5.6876


Рис.43

Исходный состав: (CO - 1) + (H<sub>2</sub>O - 1)  
Состав, моль/кг: С 17.851 О 45.605 Н 55.509  
1-й параметр: Т = 500-1500-50  
2-й параметр: р = 0.1

Удельный объем v, м3/кг  
Температура Т, К  
Значения при p=0.1 МПа

Т	v	Т	v	Т	v
500	1.5292	850	3.1142	1200	4.5501
550	1.6899	900	3.3799	1250	4.7397
600	1.8605	950	3.5944	1300	4.9293
650	2.0483	1000	3.7899	1350	5.1189
700	2.2627	1050	3.9808	1400	5.3085
750	2.5141	1100	4.1708	1450	5.4981
800	2.8063	1150	4.3605	1500	5.6876

Рис.44.

Табличное представление результатов в виде зависимости одного единственного параметра от выбранного множества значений аргумента во всех расчетных точках не всегда бывает удобным для анализа. Иногда требуется компактно представить значения всех параметров в одной расчетной точке. Чтобы изменить характер вывода достаточно нажать кнопку , расположенную в правом верхнем углу экранной формы. В результате таблица результатов примет вид, изображенный на Рис.45.

Выбор расчетной точки, для которой выводятся результаты, осуществляется с помощью прокрутки комбинированного списка, расположенного в верхней части панели. В этом режиме печать таблицы и сохранение ее содержимого в файле происходит аналогично тому, как это было описано выше.

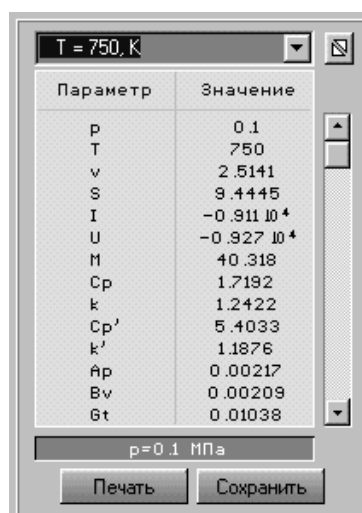


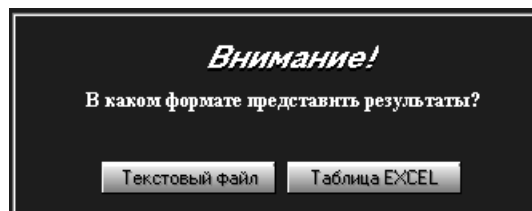
Рис.45.

В правом нижнем углу окна вывода результатов располагаются четыре кнопки общего назначения:



1) переключатель размерности выводимых величин единицы СИ / техн.сист.ед.; последовательное нажатие на эту клавишу вызывает перерисовку графика и таблицы с изменением размерности выводимых величин Дж-кг-К / кал-кг-К

2) кнопка «Сохранить все» позволяет записать в файл все результаты расчета характеристик равновесия – параметры состояния и концентрации компонентов фаз. При сохранении результатов на экран выводится дополнительное окно:



При выборе режима <Таблица EXCEL> запрашивается имя файла и создается файл формата MS EXCEL с расширением xls. На приведенном ниже фрагменте таблицы видно, что ее столбцы содержат как значения параметров состояния, так и концентрации компонентов равновесия.

	A	B	C	D	E		AB	AC	AD	AE	AF
1	p	T	v	S	I		O	O2	O3	N	N2
2	1	500	0,141681	6,73178	203,181	1	1,93E-22	11,3603	7,92E-18	1,93E-22	22,72
3	1	1000	0,283361	7,47938	745,77	5	9,8E-10	11,3694	2,06E-10	2,6E-21	22,71
4	1	1500	0,425036	7,95865	1338,29	9	2,52E-05	11,3351	6,54E-08	5,34E-13	22,65
5	1	2000	0,56674	8,32526	1976,64	1	0,004134	11,2064	1,21E-06	7,91E-09	22,56
6	1	2500	0,709288	8,6393	2682,02	2	0,088214	10,873	7,18E-06	2,55E-06	22,27
7	1	3000	0,858375	8,9551	3551,97	2	0,668695	10,1479	2,43E-05	0,000121	21,84

Рис.46.



Использование режима вывода в формате MS EXCEL облегчает последующую специальную обработку данных и позволяет переносить их в текстовый редактор MS WORD, используя буфер обмена данными.

При выборе режима <Текстовый файл> результаты расчета выводятся в виде таблицы, доступной для просмотра с помощью любого текстового редактора (в том числе с помощью «Блокнота» операционной системы Windows). Пример подобного вывода приведен на Рис.47.

Исходный состав: (CO - 1) + (H2O - 1)				
Состав, моль/кг: C 17.851 O 45.605 H 55.509				
1-й параметр: T = 500-550-50				
2-й параметр: p = 0.1				
-----				
Равновесные параметры при p=0.1 МПа, T=500 К (единицы СИ):				
p=0.1	T=500	v=1.52922	S=8.23877	I=-9886.36
U=-9948.1	M=39.624	Cp=1.48205	k=1.26003	Cp'=1.82499
k'=1.21599	Ap=0.0020605	Bv=0.0020576	Gt=0.0100142	MMg=26.258
Rg=316.641	Cpg=1.49165	kg=1.26948	Cp'g=1.69231	k'g=1.24722
Mu=0.0000188	Lt=0.041226	Lt'=0.178609	Pr=0.681487	Pr'=0.17846
A=444.05	z=0.0340992			
Равновесные концентрации (моль/кг):				
H2 = 0.20998	H2O = 21.564	C(c) = 2.839	CO = 0.8517e-3	
CO2 = 12.02	CH4 = 2.9904	C2H4 = 0.4246e-11	C2H6 = 0.1650e-5	
H2CO = 0.4462e-11	HCOOH = 0.1601e-7	CH3OH = 0.1652e-9	CH3COOH = 0.1316e-9	
CH2O2 = 0.1571e-7				
Равновесные параметры при p=0.1 МПа, T=550 К (единицы СИ):				
p=0.1	T=550	v=1.68993	S=8.42354	I=-9789.33
U=-9866.71	M=38.7833	Cp=1.5241	k=1.25251	Cp'=2.08091
k'=1.2034	Ap=0.0019488	Bv=0.0019417	Gt=0.0100367	MMg=26.4656
Rg=314.157	Cpg=1.52911	kg=1.25858	Cp'g=1.97149	k'g=1.22298
Mu=0.0000208	Lt=0.0474654	Lt'=0.355858	Pr=0.671556	Pr'=0.115488
A=458.849	z=0.0219559			
Равновесные концентрации (моль/кг):				
H2 = 0.54557	H2O = 20.387	C(c) = 1.828	CO = 0.00583	
CO2 = 12.606	CH4 = 3.4108	C2H4 = 0.7803e-10	C2H6 = 0.3664e-5	
H2CO = 0.7505e-10	HCOOH = 0.5576e-7	CH3OH = 0.8817e-9	CH3COOH = 0.3422e-11	
CH3COOH = 0.3397e-9	CH2O2 = 0.5426e-7			

Рис.47.

3) нажатие кнопки «Возврат» приводит к закрытию окна вывода результатов и возврату в Основное Окно программы.

4) нажатие кнопки «Состав» приводит к закрытию окна вывода результатов с параметрами равновесного состояния и к открытию нового окна вывода результатов, в котором отображаются равновесные концентрации фаз исследуемой системы.

#### 14. Представление равновесных концентраций компонентов фаз.

Выбор переключателя с надписью «*равновесный состав*» на форме Основного Окна программы и последующее нажатие клавиши «Результаты» (Рис.34) приводит к возникновению на экране дочернего окна, имеющего вид, показанный на Рис.48. Этот же переход выполняется после нажатия кнопки «Состав» в окне с результатами вычисления свойств системы (см. раздел 13).

Нетрудно видеть, что структура представления информации в этом окне аналогична описанной выше. Однако имеется и ряд отличий, характерных для такой

неструктурированной информации, как концентрации компонентов в системах произвольного химического состава.

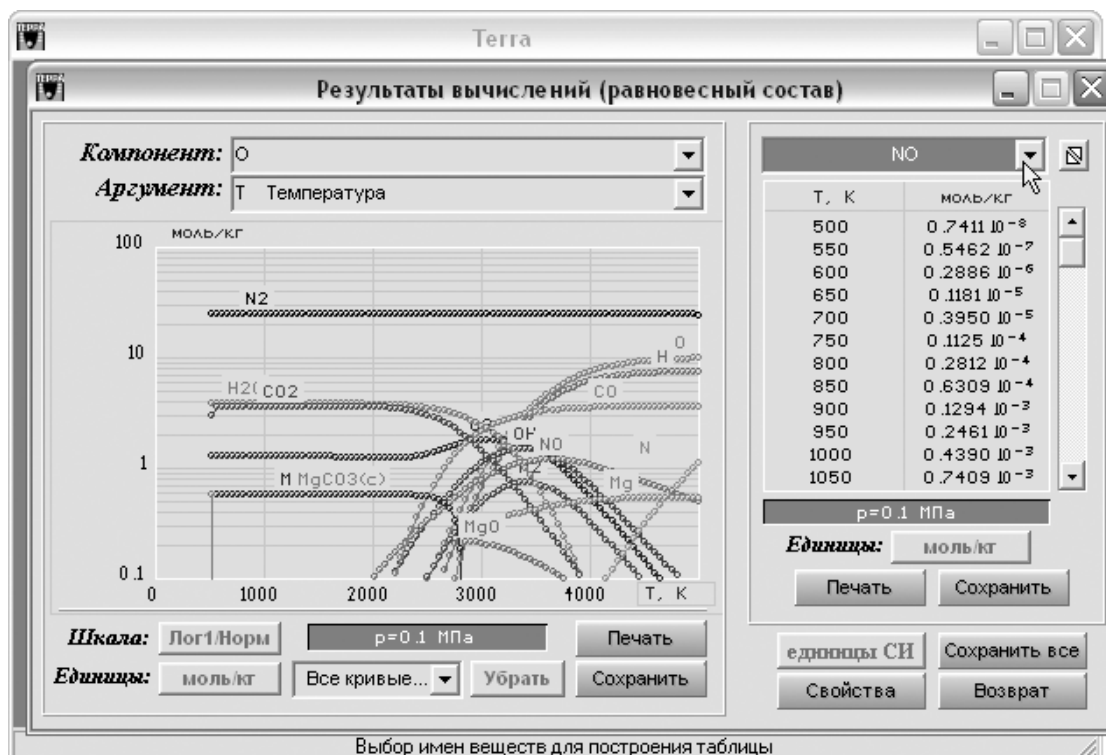



Рис.48

В момент создания окна, отображающего результаты вычисления равновесного состава, на графике представлены концентрации преобладающих компонентов. Добавление концентрационных зависимостей других индивидуальных веществ может быть выполнено путем выбора имен веществ из комбинированного списка, размещенного в верхней части левой панели. Соответственно, в нижней части панели размещены комбинированный список и клавиша «Убрать», позволяющие «стереть» выбранную кривую.

Клавиша с расположенной рядом надписью «Единицы» дает возможность отображать концентрации в различных размерностях: моль/кг, мольные доли, массовые доли, объемные доли, парциальные давления, 1/куб.см.

Правая панель окна в зависимости от состояния переключателя  содержит либо таблицу зависимости концентрации индивидуального вещества от величины выбранного аргумента, либо список концентраций всех веществ при одном значении параметра равновесия (в одной расчетной точке) (ср. Рис.48 и Рис.49).

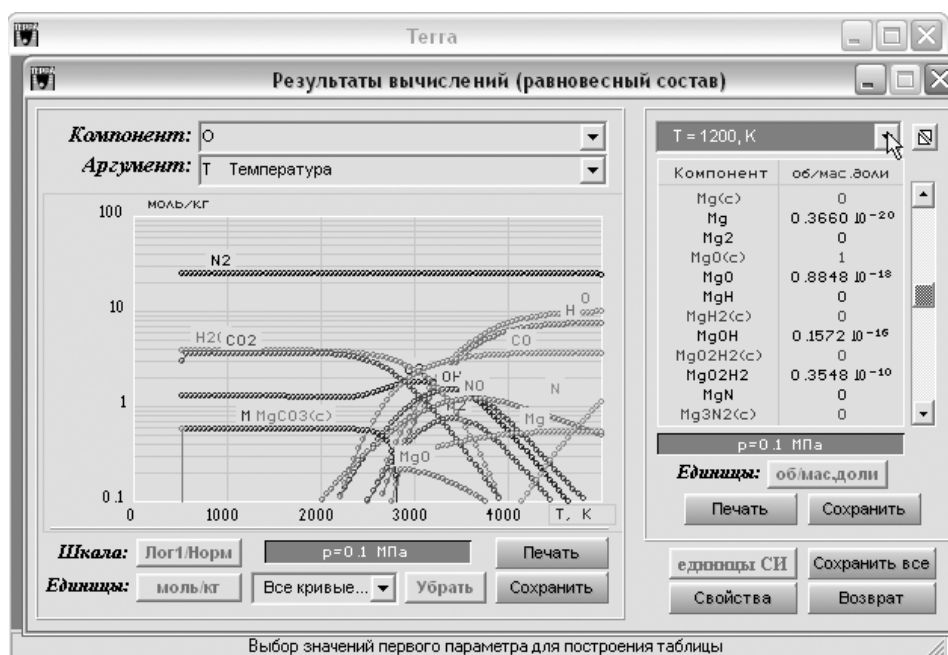


Рис. 49.

Назначение кнопок «Печать» и «Сохранить» здесь то же, что и в окне представления равновесных свойств системы. Но действие, производимое при нажатии кнопки «Сохранить все» несколько отличается от ранее описанного в предыдущем разделе. При нажатии этой кнопки и после выбора режима «Таблица EXCEL» концентрации компонентов выводятся в размерности не только *моль/кг*, но и в любой другой, выбранной путем нажатия кнопки, расположенной рядом с надписью «Единицы». Кроме того, на правой панели (Рис.49) добавлена возможность одновременно отображать объемные доли газообразных компонентов и массовые доли конденсированных веществ, нормированные к единице.