

УДК 004.65:(083.53):544.537

А.А. Вассерман, В.П. Мальчевский

Одесский национальный морской университет, ул. Мечникова, 34, г. Одесса, Украина, 65029

e-mail: avas@paso.net

БАНКИ ДАННЫХ И АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ ПО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

Данные о термодинамических свойствах и коэффициентах переноса газов и жидкостей необходимы для многих отраслей науки и техники. По мере накопления таких данных и описывающих их уравнений стали создавать банки данных и автоматизированные информационные системы, обеспечивающие пользователей данными о свойствах веществ. Наиболее известные из указанных источников информации рассмотрены в настоящей статье.

Ключевые слова: Газы. Жидкости. Термодинамические свойства. Коэффициенты переноса. Банки данных. Автоматизированные информационные системы.

A.A. Vasserman, V.P. Malchevskiy**DATABANKS AND AUTOMATED INFORMATION SYSTEMS ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS**

Data on thermodynamic and transport properties of gases and liquids are necessary for many branches of science and technique. After obtaining such data and equations which describe them, databanks and automated information systems begin to create. They provide users of data on properties of substances. The most known from mentioned sources of information are considered in this paper.

Keywords: Gases. Liquids. Thermodynamic properties. Transport properties. Databanks. Automated information systems.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для проектирования и исследования криогенных и холодильных установок и агрегатов химической и газовой промышленности необходимы достоверные данные о теплофизических свойствах рабочих веществ в разных системах независимых переменных и в широкой области значений этих переменных. Достаточно надёжными источниками информации о свойствах веществ и материалов являются банки данных и автоматизированные информационные системы. В настоящей статье приведён обзор наиболее известных банков данных и автоматизированных информационных систем, позволяющих определять теплофизические свойства газов и жидкостей. Большое внимание уделено банкам и системам, разработанным в России и Украине.

2. БАНКИ ДАННЫХ

В последние три десятилетия созданы банки данных (БД) и автоматизированные информационные системы (АИС), предоставляющие пользователям сведения о свойствах веществ и материалов. Они являются важным источником данных о теплофизиче-

ских свойствах (ТФС) веществ для учёных и специалистов. Банки данных обеспечивают централизованное накопление в электронной форме и коллективное использование имеющихся экспериментальных и расчётных данных. Многие БД наряду с библиографической информацией и значениями свойств содержат также уравнения, аппроксимирующие эти данные.

Появление БД и АИС несколько ограничило сферу использования традиционных печатных таблиц свойств. Последние, несомненно, сохраняют ценность как первичный источник данных. Однако теперь эффективные схемы установок и оптимальные конструкции машин и аппаратов для различных отраслей техники разрабатываются на основании результатов многовариантных расчётов, при которых необходимы значения ТФС. В таких условиях целесообразно хранить требуемую информацию о ТФС в виде уравнений, включённых в БД либо АИС и позволяющих многократно рассчитывать свойства при значениях параметров, задаваемых пользователями.

Обзор банков и систем по ТФС, функционировавших в 1974-1995 гг., приведён в монографиях [1,2]. После 1995 г. активизировалась разработка БД и АИС по свойствам веществ. Многие из них демонстрировались на симпозиумах по ТФС, каждые три

года организуемых в Булдере (США) на базе Национального института стандартов и технологий (NIST). Доклады по этой тематике представлены также на европейских и российских конференциях по ТФС.

В табл. 1 приведены краткие сведения о наиболее известных банках данных по теплофизическим свойствам газов и жидкостей и даны ссылки на соответствующие публикации. Большинство этих БД (а также АИС, перечисленных в табл. 2, раздел 3) могут обеспечивать пользователей данными о ТФС воздуха, его компонентов и других технически важных газов. Разработчики программ для банков и систем по мере их совершенствования публиковали обычно ряд статей либо делали доклады на научных конференциях, где отражали внесённые изменения и дополнения. Поэтому в настоящей статье указаны только основные работы, дающие достаточно полное представле-

ние о рассматриваемых БД и АИС. Объём информации приведён по данным этих публикаций; в настоящее время он, естественно, мог увеличиться.

В Объединённом институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) около 30-ти лет тому назад были созданы банки ТЕРМАЛЬ и ИВТАНТЕРМО [3-5]. В банке ТЕРМАЛЬ к 2008 г. накоплены описания около 80000 статей и сведения о 200 свойствах 15000 чистых веществ [4]. Как отмечено в [4], технологическая часть этого БД усовершенствуется для ускорения доступа специалистов, разыскивающих данные по библиографическим ссылкам, к самим данным.

ИВТАНТЕРМО хранит данные о физических константах и термодинамических свойствах (ТДС) 1200 веществ в идеально-газовом состоянии в широком интервале температур (100-6000) К [5]. Модули

Таблица 1. Банки данных по теплофизическим свойствам веществ

Наименование банка и публикации о нём	Организация-разработчик	Генерируемые свойства и объём информации
ТЕРМАЛЬ [3,4]	ОИВТ РАН (Москва)	Описания 80000 статей и данные о 200 свойствах 15000 веществ
ИВТАНТЕРМО [3,5]		Физические константы и свойства 1200 веществ в идеально-газовом состоянии
БД по физико-химическим свойствам частиц и индивидуальных веществ [6]	МГУ им. М.В. Ломоносова и ОИВТ РАН	Данные о ТДС индивидуальных веществ и модули расчёта ТДС, молекулярные постоянные
Термические константы веществ [7]		Данные об энтальпии образования, энтропии, теплоёмкости c_p при 298,15 К для 27000 веществ из справочника [8]
Электронный справочник по свойствам веществ [9]	ОИВТ РАН	Таблицы свойств 20 веществ и программы для расчёта свойств 9 веществ
Банк данных МАИ [10,11]	Московский авиационный институт	2000 таблиц ТФС газов, жидкостей и смесей из справочника [12] и программы для интерполяции данных
NIST/TRC SOURCE [13]	Национальный институт стандартов и технологий — NIST (Булдер, США)	Описания 83000 статей и миллион численных данных о 120 свойствах 17000 чистых веществ и 11000 смесей
NIST/TRC WinTable [13]		Полмиллиона данных и 4500 уравнений для 33 свойств 7500 соединений
DIPPR [14,15]	Проектный институт по данным о физических свойствах (США)	Данные о 49 свойствах для 2100 веществ
DETERM [16,17]	DEHEMA (Франкфурт на Майне)	5,6 миллиона численных данных для 20000 чистых веществ и 100000 смесей и библиографические данные
DDB [18]	Дортмундский университет	Данные о фазовом равновесии чистых веществ и смесей
GPA [19]	EPSON (Хьюстон, США) DDBST (Ольденбург)	Данные о фазовом равновесии углеводородов
INFOTHERM [20]	FIZ CHEMIE (Берлин)	172000 таблиц с данными о свойствах 7000 чистых веществ и 26000 смесей
KDB [21]	Сеульский университет	Данные о свойствах 4000 чистых веществ и смесей и 5000 наборов данных о фазовом равновесии
База данных о ТФС [22]	Японский национальный метрологический институт	Данные о ТФС газов, жидкостей и твёрдых тел

и алгоритмы, лежащие в основе этого банка, использованы при создании в МГУ им. М.В. Ломоносова и ОИВТ РАН нового банка данных по физико-химическим свойствам частиц и индивидуальных веществ и кинетическим характеристикам физико-химических процессов [6].

В МГУ и ОИВТ РАН создана также база данных «Термические константы веществ» [7] на основе известного справочника [8], подготовленного под руководством академика В.П. Глушко группой из 80 специалистов в области химической термодинамики. База содержит сведения об энтальпии образования, энергии Гиббса, энтропии и изобарной теплоёмкости при 298,15 К и некоторые другие данные для 27000 веществ, образованных практически всеми химическими элементами. Интернет-версия базы доступна по адресу: www.chem.msu.ru/gus/termo.

Представляет определённый интерес подготовленный в ОИВТ РАН электронный справочник по свойствам веществ [9]. Он содержит таблицы ТФС более 20 веществ и программы для расчёта свойств 9-ти веществ, включая воздух, азот и кислород. Справочник распространяется через Web-сайт теплофизического центра ОИВТ РАН. Данные о ТФС криогенных веществ имеются в БД, созданном в Московском авиационном институте (МАИ) [10,11]. В основу банка положено третье дополненное издание справочника Н.Б. Варгафтика [12].

Из банков дальнего зарубежья широко известны БД термодинамического исследовательского центра (TRC), являющегося одним из старейших исследовательских центров США [23]. Он был создан в 1942 г. в Национальном бюро стандартов (ныне NIST), с 1961 г. находился в Техасском университете [2], а в 2000 г. возвращён в NIST. Банки центра содержат библиографическую и экспериментальную информацию о ТФС большого числа веществ, в том числе углеводородов и атмосферных газов, и продолжают накапливать данные.

Банк NIST/TRC SOURCE [13] функционирует с 1986 г. как большой архив экспериментальных данных о теплофизических и термодинамических свойствах, опубликованных в мировой научной литературе. В 2003 г. этот банк содержал описания 83000 статей и миллион численных данных о 120 свойствах 17000 чистых веществ и 11000 смесей. В банке есть информация о погрешностях определения свойств веществ, что полезно при использовании либо при статистической обработке данных, полученных с помощью банка.

Банк данных NIST/TRC WinTable [13] хранит рекомендованные значения ТФС чистых веществ, опубликованные термодинамическим центром в период нахождения в Техасском университете. Этот банк фактически является электронной версией таблиц TRC для углеводородов и других веществ, которые издавались, начиная с середины прошлого века. В 2003 г. банк содержал полмиллиона данных и 4500 уравнений для 33 свойств 7500 соединений.

При участии сотрудников NIST/TRC в Московском энергетическом институте (МЭИ) создаётся база

данных о ТФС и термодинамических характеристиках веществ [24] с целью обеспечения перспективных технологий для электроэнергетики и нефтехимии необходимыми данными. При формировании файлов применяется опыт, накопленный в NIST/TRC. База данных МЭИ будет ассоциированной информационной системой применительно к упомянутым технологиям.

Проектный институт по физическим свойствам (DIPPR, США) разработал базу данных DIPPR 801 [14,15]. При обеспечении пользователей данными о свойствах база анализирует все данные для конкретного вещества и выбирает самые точные. При отсутствии экспериментальных данных о некоторых свойствах необходимые значения рассчитываются с помощью наиболее надёжных методов. База DIPPR 801 содержит данные о 49 свойствах, из которых 15 зависят от температуры, примерно для 2100 технически важных веществ.

Весьма большое количество данных о ТФС (5,6 миллиона для 20000 чистых веществ и 100000 смесей) накоплено в банке DETHERM [16,17], созданном немецким обществом по химической технике и биотехнологии DECHEMA во Франкфурте на Майне благодаря усилиям нескольких научных коллективов, в том числе университетов Ольденбурга и Реренсбурга. Адрес банка: <http://i-systems.dechema.de/detherm>. Банк хранит численные и библиографические данные о ТФС, фазовом равновесии, критических параметрах, поверхностном натяжении и свойствах электролитов. В банке имеются программы для аналитического описания данных и моделирования некоторых технологических процессов [17].

Солидный банк DDB создан также в Дортмундском университете [18]; в этом банке особое внимание уделено данным о фазовом равновесии чистых веществ и смесей. Данные могут быть представлены в графическом виде и аппроксимированы уравнениями. Банк GPA, разработанный совместно американскими и немецкими специалистами [19], содержит данные о фазовом равновесии углеводородов и обеспечивает потребности газовой промышленности.

Сравнительно недавно появилось сообщение о банке INFOTHERM, содержащем 172000 таблиц с данными о ТФС 7000 чистых веществ и 26000 смесей [20]. В банке имеются данные о p, v, T -зависимости, фазовом равновесии, калорических, акустических, переносных и оптических свойствах, заимствованные из журнальных статей и научных отчётов. Данные хранятся в виде, соответствующем стандарту IUPAC по их хранению и обмену с другими банками и потребителями [25].

Корейская база данных о теплофизических свойствах KDB [21] содержит информацию для 4000 чистых компонентов и смесей (углеводородов, электролитов и полимеров) и 5000 наборов данных о фазовом равновесии. Большинство данных сопровождается информацией о точности измерений. Для расчёта свойств в однофазной области и в состоянии фазового равновесия используется большое количество методов и термодинамических моделей. Эта база данных доступна в

сети Интернет на сайте <http://thermo.korea.ac.kr>.

В Японском национальном метрологическом институте создана база данных о ТФС [22] благодаря сотрудничеству учёных, проводящих такие исследования в ряде организаций. База содержит данные о плотности, теплоёмкости, вязкости, теплопроводности и других свойствах веществ и материалов, включая газы и жидкости. В базе имеется гибкая поисковая система, обеспечивающая поиск материала либо свойства. Адрес базы в сети Интернет: <http://www.aist.go.jp>.

Создатели банков данных стараются оптимизировать их работу. Например, в NIST разработана программа управления вводом данных GDC [23] для импорта экспериментальных данных о ТФС и термодинамических свойствах из литературных источников в банк данных. Программа позволяет получать данные от авторов статей в пяти ведущих научных журналах уже в процессе публикации. Программа GDC используется также для создания доступных в Интернете файлов ThermoML, в которых приведены опубликованные данные.

Институт DIPPR при содействии Американского института химических инженеров (AIChE) разработал проект DIPPR/AIChE Project 991 [26] для обеспечения взаимного обмена данными о ТФС между базой данных DIPPR 801 и другими базами, а также между наиболее известными программами для расчёта технологических процессов. В результате создан стандарт обмена PPDХ, применение которого исключает дополнительную работу специалистов по реформатированию данных и облегчает контроль достоверности данных при их использовании в разных программах.

В 2006 г. американские учёные разработали комплекс программ [27] для анализа достоверности данных о ТФС. Комплекс действует по тому же принципу, что и в базе DIPPR 801, может использоваться в любых БД и позволяет не только минимизировать типографские ошибки, но и выполнять детальную проверку данных. Возможности комплекса лежат в диапазоне от простой автоматической замены данных до сложного анализа, для проведения которого необходимо наличие у пользователя знаний в области термодинамики.

Основные программы указанного комплекса выполняют автоматический контроль качества данных, термодинамический анализ, анализ межмолекулярного взаимодействия и расчёт свойств. Контроль качества предусматривает 39 проверок внутренней согласованности данных для конкретного вещества либо для группы веществ. При термодинамическом анализе сопоставляются значения свойств, полученные разными методами. Это позволяет, в частности, выявлять систематические ошибки измерений.

Принцип работы программы для анализа межмолекулярного взаимодействия состоит в том, что химические соединения с одинаковой молекулярной структурой должны иметь близкие ТФС. Выявленные зависимости между молекулярной структурой и свойствами веществ также дают информацию для идентификации ошибок в данных. При отсутствии эксперимен-

тальных данных о некоторых свойствах используется программа для расчёта ТФС, выбирающая из многих расчётных методов наиболее эффективный для конкретного случая.

Разработка проекта 991 [26] и рассмотренного комплекса программ [27] демонстрирует большие возможности совершенствования существующих банков данных.

3. АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ

При всех достижениях вычислительной техники непрерывный рост объёма информации, хранящейся в БД, усложняет процесс её выбора для конкретных веществ. Поэтому в случаях использования данных о свойствах ограниченного числа веществ для решения прикладных задач вполне эффективны автоматизированные информационные системы (см. табл. 2). В отличие от банков данных, эти системы не хранят численные значения свойств, но с помощью включённых в них программных модулей и уравнений могут генерировать неограниченный объём информации при различных комбинациях независимых переменных. Такие АИС достаточно просты по структуре и в эксплуатации и могут быть установлены в персональных компьютерах пользователей. При этом можно обеспечить оперативное взаимодействие АИС с прикладными программами.

В России и Украине еще в 70-ые годы XX-го века были разработаны автоматизированные системы АИСТ [28] (ВНИЦ МВ Госстандарта) и АВЕСТА [29] (ВНИИПКНефтехим, Киев). Система АИСТ генерировала данные о ТФС группы технически важных газов, включающей воздух и его компоненты. АВЕСТА предоставляла пользователям информацию о свойствах многих веществ, в том числе углеводородов и нефтепродуктов, а также экспериментальные и библиографические данные, т.е. сочетала особенности АИС и БД. Обе системы обеспечивали данными многие организации СССР и стран-членов СЭВ и входили в состав комплексной системы оперативного обеспечения народного хозяйства нормативно-справочными данными о теплофизических свойствах технически важных газов и жидкостей, отмеченной Премией Совета Министров СССР в 1987 г.

В Одесском национальном морском университете (ОНМУ) и Одесской государственной академии холода (ОГАХ) разработана АИС Air-Pro для определения свойств азота, кислорода, аргона и воздуха [30]. Система обеспечивает расчёт 20 ТФС, в частности плотности, энтальпии, энтропии, изохорной и изобарной теплоёмкостей, скорости звука, адиабатного дроссель-эффекта, динамической вязкости и теплопроводности. Свойства могут быть определены в однофазной и двухфазной областях и на линиях фазового равновесия при температурах от тройной точки до 2500 К и давлениях до 100 МПа для 9 комбинаций независимых переменных. При этом используются как уравнения из таблиц стандартных справочных данных

и монографии [43], так и новые зарубежные уравнения. Позднее те же авторы создали АИС Thermo-Pro [31], рассчитывающую ТФС 20 газов и жидкостей: одноатомных и двухатомных газов, воздуха, воды и водяного пара, диоксида углерода, аммиака, углеводородов метанового ряда и нескольких хладагентов.

В дальнейшем ряд программ из этих систем использован в АИС Cryo-Syst [32], предназначенной не только для определения ТФС, но и для расчёта и исследования процессов криогенных установок. С помощью этой системы на базе найденных значений свойств могут быть рассчитаны процессы изотермического сжатия, адиабатного дросселирования, политропного расширения, теплообмена в теплообменных аппаратах, разделения смеси пара и жидкости в сосуде с жидкостью и ректификации в установке для разделения воздуха.

Опыт, накопленный при разработке систем [30,31], использован при создании АИС Cryo-Refr [33] для расчёта свойств криогенных веществ и альтернативных хладагентов. Она рассчитывает плотность, энтальпию, энтропию, изохорную и изобарную теплоёмкости и ряд других свойств около тридцати технически важных веществ: одноатомных газов, азота, кислорода, воздуха, диоксида углерода, аммиака, некоторых углеводородов, а также альтернативных хладагентов и их смесей. Свойства можно определять при температурах от тройной точки до 1500 К и давлениях до 100 МПа при 11 комбинациях независимых переменных. Для определения погрешностей значе-

ний свойств можно использовать при расчётах уравнения разных авторов. Система имеет удобный интерфейс и сохраняет результаты расчётов для использования в прикладных программах.

Недавно появилось сообщение о системе термодинамических автоматизированных расчётов свойств «СТАРС» [34], разработанной московскими специалистами. Система рассчитывает ТФС и фазовое состояние индивидуальных веществ, нефтяных фракций, смесей, в том числе смесей углеводородов с нефтяными фракциями. Рассчитываются плотность, коэффициент сжимаемости, энтальпия, изохорная и изобарная теплоёмкости, динамическая и кинематическая вязкость, теплопроводность и ряд других свойств газов и жидкостей. Программа позволяет также находить некоторые величины, относящиеся к задачам фазового равновесия. База данных опорных констант содержит информацию о 1600 индивидуальных веществах и нефтепродуктах.

Из АИС и БД, разработанных в дальнейшем зарубежье и описанных в монографии [2], отметим систему центра по ТФС Империял колледжа (Лондон). В неё включены уравнения состояния из наиболее солидных публикаций, в частности из монографий, подготовленных Международным союзом по теоретической и прикладной химии (IUPAC). В системе также имеются уравнения для расчёта свойств переноса технически важных веществ.

Среди АИС, активно функционирующих в США в последнее время, широко известны системы NIST

Таблица 2. Автоматизированные информационные системы по теплофизическим свойствам веществ

Наименование системы и публикации о ней	Организация-разработчик	Вещества, для которых рассчитываются свойства
АИСТ [28]	ВНИЦ МВ (Москва)	Технически важные газы и жидкости
АВЕСТА [29]	ВНИИПКНефтехим (Киев)	Технически важные вещества, включая углеводороды и нефтепродукты
Air-Pro [30]	ОНМУ-ОГАХ (Одесса)	Азот, кислород, аргон и воздух
Thermo-Pro [31]		Одно- и двухатомные газы, воздух, вода и водяной пар, диоксид углерода, углеводороды метанового ряда
Cryo-Syst [32]		12 криогенных веществ и программы для расчёта криогенных установок
Cryo-Refr [33]	ОНМУ	Криогенные вещества, альтернативные хладагенты и их смеси
СТАРС [34]	ООО НТП Трубопровод (Москва)	1600 индивидуальных веществ, нефтяных фракций и смесей
Система центра по свойствам веществ [2]	Империял колледж (Лондон)	Технически важные газы и жидкости (по монографиям IUPAC)
NIST Chemistry WebBook [35]	NIST (Булдер, США)	74 вещества, в том числе криогенные
REFPROP [36,37]		100 веществ и 145 смесей
Solkane [38]	Международная компания Solvay (Брюссель)	21 хладагент и программы для расчёта циклов холодильных установок
Библиотеки свойств рабочих веществ [39,40]	Университет г. Зиттау (Германия)	25 газов и их смесей
CoolPack [41]	Технический университет Дании (Лингби)	45 хладагентов и программы для расчёта холодильных установок
PROPATH [42]	Университеты Нагасаки и Киушу (Япония)	Одно- и двухатомные газы, аммиак, вода, углеводороды и хладагенты

Chemistry WebBook [35] и REFPROP [36,37]. Интерактивная система [35] генерирует данные о плотности, удельном объёме, внутренней энергии, энтальпии, энтропии, теплоёмкостях c_v и c_p , адиабатном дроссель-эффекте, скорости звука, динамической вязкости, теплопроводности и поверхностном натяжении 74 технически важных веществ, в том числе криогенных. Система представляет данные в табличном и графическом виде и может определять свойства в однофазной области на изотермах, изобарах, изохорах и в двухфазной области в координатах T, x и p, x . Для построения диаграмм пользователь может выбрать любые два свойства, имеющиеся в таблице результатов. Кроме таблиц свойств и диаграмм, система даёт ссылки на источники, из которых взяты уравнения для расчёта ТФС и оценки возможных погрешностей рассчитанных значений свойств. Система относится к бесплатным ресурсам Интернета, её адрес: <http://webbook.nist.gov>.

Коммерческая система REFPROP [36,37] позволяет рассчитывать ТФС хладагентов и их смесей, причём для каждого вещества можно использовать несколько уравнений, наиболее точное из которых — рекомендованное, а остальные — альтернативные. Свойства смесей система рассчитывает с привлечением функции взаимодействия, которая для исследованных смесей определяется по экспериментальным данным о ТДС, а для неисследованных — по обобщённому уравнению. Версия системы 8.1 обеспечивает расчёт 49 теплофизических свойств 100 чистых веществ и 145 смесей. Пользователи могут также определять ТДС смесей заданного ими состава, если модель расчёта, используемая в системе, применима для компонентов смеси. Система даёт возможность изображать термодинамические процессы на диаграммах T, s ; T, h ; p, h .

Международной химико-фармацевтической компанией Solvay разработана система Solkane [38], рассчитывающая 15 свойств 21-го хладагента (в основном продуктов этой компании) в однофазной и двухфазной областях и на кривой насыщения. Возможен также расчёт параметров характерных точек циклов одно- и двухступенчатых холодильных установок и размеров трубопроводов. Система обеспечивает пользователей диаграммами p, h и T, s для хладагентов, выпускаемых компанией, и по запросу выдаёт исчерпывающую информацию об этих веществах — от физических свойств до упаковки и транспортировки. Она размещена на сайте: www.solvay-fluor.com.

Недавно немецкие исследователи разработали комплекс программ для расчёта ТФС 25-ти рабочих веществ энергетических и холодильных установок [39,40]. Среди этих веществ — влажный воздух и продукты сгорания, вода и водяной пар, диоксид углерода, аммиак, гелий, водород, метанол, некоторые углеводороды и хладагенты. Влажный воздух и продукты сгорания рассматриваются как идеальная смесь, а их компоненты — как реальные газы.

В Техническом университете Дании создана система CoolPack [41] для проектирования и оптимизации холодильных установок. В ней есть программы

для расчёта свойств 45-ти хладагентов, включая воздух и его компоненты, в однофазной области (при 8-ми сочетаниях независимых переменных) и в состоянии насыщения. В число свойств входят p, v, T -данные, энтальпия, энтропия, теплоёмкости c_v и c_p , скорость звука, показатель адиабаты, динамическая вязкость и теплопроводность. Предусмотрена возможность построения диаграмм T, s ; h, s и lgp, h для хладагентов и диаграммы H, d для влажного воздуха. Система включает программы для расчёта циклов одно- и двухступенчатых холодильных установок, энергетического анализа, расчёта холодильных систем и вспомогательного оборудования и динамических расчётов. Эта система, как и АИС [32] — пример сочетания программ для расчёта свойств с прикладными программами. Её адрес в Интернете: www.et.dtu.dk/CoolPack.

Японские ученые разработали систему PROPATH [42], рассчитывающую теплофизические свойства свыше 50-ти чистых веществ и смесей постоянного состава, включая воздух. Система обеспечивает расчёт тех же свойств, что и рассмотренная выше система CoolPack, и ряда других свойств, общее число которых равно 25. Возможен расчёт свойств влажного воздуха и смесей идеальных газов, а также свойств бинарных смесей по обобщённым уравнениям. Результаты расчётов могут быть представлены в табличном и графическом виде. Система доступна в Интернете по адресу: <http://www2.mech.nagasaki-u.ac.jp/PROPATH/>.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданные за последние десятилетия БД и АИС хранят в электронном виде большой объём ценной информации о ТФС чистых веществ и смесей. Автоматизированные системы, позволяющие оперативно определять свойства при различных сочетаниях независимых переменных и заменять при расчётах диаграммы состояния, имеют заметные преимущества по сравнению с обычными справочниками. Целесообразно создавать специализированные системы, объединяющие программы расчёта свойств и прикладные программы для проектирования различных узлов криогенных, химических и энергетических установок.

Авторы благодарны сотруднику NIST профессору И.М. Абдулагатову за предоставленные материалы по истории термодинамического исследовательского центра NIST/TRC.

ЛИТЕРАТУРА

1. Теплоэнергетика и теплотехника: Общие вопросы: Справочник (Книга 1)/ Г.Г. Бартоломей, В.Л. Благоднадежин, Д.Б. Вольфсберг и др.; Под общ. ред. В.А. Григорьева, В.М. Зорина. — 2-е изд. перераб. — М.: Энергоатомиздат, 1987. — 456 с.
2. Transport Properties of Fluids. Their Correlation, Prediction and Estimation/ М.А. Assael, Е. Bich, R.J.B. Craven and oth.; Edited by J. Millat, J.H. Dymond, С.А.

Nieto de Castro. — Cambridge: Cambr. University Press, 1996. — 483 p.

3. **Байбуз В.Ф.** Исследования теплофизических свойств веществ и банки теплофизических данных в Советском Союзе/ Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. — М.: ИВТАН, 1984. — № 3 (47). — С. 3-25.

4. **Трахтенгерц М.С.** Хранение и поиск информации о свойствах в БД ТЕРМАЛЬ// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 192-193.

5. **Гурвич Л.В.** Банк данных ИВТАНТЕРМО// Вестник АН СССР. — 1983. — № 3. — С.54-58.

6. Банк данных по физико-химическим свойствам частиц и индивидуальных веществ и кинетическим характеристикам физико-химических процессов/ **Г.В. Белов, В.С. Иориш, М.В. Окунь и др.**// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 189.

7. База данных «Термические константы веществ»/ **Г.В. Белов, Г.А. Бергман, В.С. Иориш и др.**// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 190-191.

8. Термические константы веществ: Вып. 1-10/ Отв. ред. **В.П. Глушко.** — М.: ВИНТИ, 1965-1982.

9. Электронный справочник по свойствам веществ и его использование в учебном процессе/ **Г.А. Кобзев, В.В. Ягов, В.Ю. Цицерман и др.**// Тезисы докл. X Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — Казань: Изд-во «Бутлеровские сообщения», 2002. — С. 191-193.

10. **Виноградов Ю.К., Лопатин В.И., Яргин В.С.** Теплофизические свойства газов и жидкостей (база данных)// Тезисы докл. X Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — Казань: Изд-во «Бутлеровские сообщения», 2002. — С. 189-190.

11. **Виноградов Ю.К.** Теплофизические свойства газов и жидкостей (база данных)// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 191-192.

12. **Vargaftik N.B., Vinogradov Yu.K., Yargin V.S.** Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases. — NY: Begell House Inc., 1996. — 942 p.

13. NIST/TRC Databases and Software for Chemistry and Engineering/ **M. Frenkel, R.D. Chirico, Q. Dong and oth.**// CD ROM of the Fifteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2003. — File p548.

14. **Wilding W.V., Rowley R.L., Oscarson J.L.** DIPPR Project 801 Evaluated Process Design Data// Fluid Phase Equil. — 1998. — V.150-151. — P. 413-420.

15. Rapid Evaluation of Prediction Methods with DIPPR's Automated Property Prediction Package// **J.R. Rowley, W.V. Wilding, J.L. Oscarson, R.L. Rowley**// Int. J. Thermophys. — 2007. — V. 28. — No 3. — P. 824-834.

16. **Westhaus U., Sass R.** From Raw Physical Data to Reliable Thermodynamic Model Parameters through DECHEMA Data Preparation Package// Fluid Phase Equil. — 2004. — V. 222-223. — P. 49-54.

17. **Sass R., Westhaus U.** Reliable Process Modelling with Accurate Thermophysical Property Data and Models Using the DETHERM Professional Suite// CD ROM of the Seventeenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colo-

rado, USA, 2009. — File p881.

18. The Dortmund Databank (DDB) — A Comprehensive Database for Thermophysical Properties/ **W. Cordes, J. Menke, K. Fischer and oth.**// Abstracts of the Fifteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2003. — P. 125.

19. **Willman T., Rarey J.** The GPA Bank, 5th Edition// CD ROM of the Seventeenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2009. — File p453.

20. **Homann J., Schmidt M.** Infotherm: Thermophysical Data of Mixtures and Pure Compounds// CD ROM of the Sixteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2006. — File p2020.

21. Development and Current Status of the Korea Thermophysical Properties Databank (KDB)/ **J.W. Kang, K.-P. Yoo, H.Y. Kim and oth.**// Int. J. Thermophys. — 2001. — V. 22. — No 2. — P. 487-494.

22. **Baba T.** Development of a Network Database for Thermophysical Property Data// CD ROM of the Sixteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2006. — File p851.

23. NIST/TRC Databases and Software Tools for Chemistry and Engineering/ **M. Frenkel, R.D. Chirico, V.V. Diky and oth.**// CD ROM of the Seventeenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2009. — File p661.

24. Приложение процедур NIST/TRC — базы данных для анализа теплофизической информации/ **Е.Е. Устюжанин, Б.Ф. Реутов, И.М. Абдулагатов, М. Френкель**// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 193.

25. ThermoML: A New IUPAC Standard for Thermodynamic Data Communication/ **M. Frenkel, R.D. Chirico, V.V. Diky and oth.**// CD ROM of the Sixteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2006. — File p2347.

26. **Dewan A.K., Embry D.L., Willman T.J.** DIPPR/AIChE Project 991 — Thermophysical Property Data Exchange// Abstracts of the Fourteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2000. — P. 169.

27. Database Tools for Evaluating Thermophysical Property Data/ **R.L. Rowley, W.V. Wilding, J.L. Oscarson, Y. Yang**// CD ROM of the Sixteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2006. — File p823.

28. Автоматизированная система стандартных справочных данных о теплофизических свойствах газов и жидкостей. Обзорная информация/ **В.П. Воронина, Н.Е. Гнездилов, А.Д. Козлов и др.** — М.: ГСССД, 1977. — 26 с.

29. Автоматизированная единая система теплофизического абонирования АВЕСТА. Технические условия на опытную эксплуатацию. — Киев: ВНИИПКНефтехим, 1974. — 49 с.

30. **Вассерман А.А., Бодюл С.В.** Автоматизированная система для определения теплофизических свойств воздуха и его компонентов// Технические газы. — 2001. — № 3. — С. 4-9.

31. **Вассерман А.А., Бодюл С.В.** Автоматизированная система для определения теплофизических свойств газов и жидкостей// Тезисы докл. X Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — Казань: Изд-во «Бутлеровские со-

общения», 2002. — С. 202-204.

32. **Vasserman A.A., Bodyul S.V., Bodyul E.S.** Automated System for Calculating Thermophysical Properties of Fluids and Thermal Processes of Cryogenic Plants// Int. J. Thermophys. — 2004. — V. 25. — No 2. — P. 371-377.

33. **Вассерман А.А., Мальчевский В.П.** Система для расчёта теплофизических свойств криогенных веществ и альтернативных хладагентов// Технические газы. — 2007. — № 5. — С. 54-58.

34. **Корельштейн Л.Б., Лисман В.Ф.** Система расчёта теплофизических свойств веществ и фазовых равновесий «СТАПС»// Тезисы докл. XII Российской конф. по теплофиз. свойствам веществ. — М.: Изд-во «Интерконтакт Наука», 2008. — С. 260.

35. **Linstrom P.J., Mallard W.G.** The NIST Chemistry WebBook: A Chemical Data Resource on the Internet// Abstracts of the Fourteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2000. — P. 315.

36. **Lemmon E.W., McLinden M.O., Huber M.L.** The REFPROP Database for the Thermophysical Properties of Fluids// CD ROM of the Fifteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2003. — File p138.

37. **Lemmon E.W., Huber M.L., McLinden M.O.** REFPROP — Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties// CD ROM of the Seventeenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2009. — File p599.

38. Solkane Refrigerant Software — Version 6.0.0.3// Sol-

vay Fluor GmbH Technical Service-Refrigerants-PO Box 220.

39. Property Database for Humid Combustion Gases, Humid Air, Water and Steam For Calculating Heat Cycles and Turbines/ **H.-J. Kretzschmar, I. Stocker, K. Knobloch and oth.**// Abstracts of the Sixteenth European Conference on Thermophysical Properties, 1-4 September 2002, London, UK.

40. Property Libraries for Working Fluids for Calculating Heat Cycles, Boilers, Turbines, Heat Pumps, and Refrigerating Processes/ **H.-J. Kretzschmar, I. Stoecker, M. Kunick, S. Herrmann**// CD ROM of the Seventeenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2009. — File p530.

41. CoolPack, A Collection of Simulation Tools for Refrigeration — Version 1.46/ **M.J. Skovrup, A. Jacobsen, B.D. Rasmussen, S.E. Andersen**// Technical Univ. of Denmark, Dept. of Mechanical Engineering, Lyngby, Denmark, 2000.

42. Development of Program Package for Thermophysical Properties of Fluids: PROPATH — Availabilities of Dynamic Link Library (DLL) in Windows Applications/ **T. Yamaguchi, R. Akasaka, T. Honda and oth.**// CD ROM of the Sixteenth Symp. on Thermophys. Prop. — Boulder, Colorado, USA, 2006. — File p1039.

43. Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях: Справочник/ **В.Н. Зубарев, А.Д. Козлов, В.М. Кузнецов и др.** — М.: Энергоатомиздат, 1989. — 232 с.



Восьмая международная специализированная выставка

Криоген-Экспо

10-12 ноября 2009 г. Москва, ЦВК «ЭКСПОЦЕНТР», пав.6

Организатор:



Проводится при содействии:

- ▶ Международного института холода
- ▶ Международной академии холода
- ▶ Украинской ассоциации производителей технических газов «УА-СИГМА»

Информационная поддержка:



ТЕМАТИКА ВЫСТАВКИ:

- ▶ Криогенное оборудование
- ▶ Гелиевое оборудование
- ▶ Вакуумное оборудование
- ▶ Холодильное и компрессорное оборудование
- ▶ Микрокриогенная техника
- ▶ Сжиженный природный газ
- ▶ Промышленные и редкие газы
- ▶ Применение криогенных технологий в промышленности
- ▶ Системы безопасности

- ▶ Применение криогенных технологий в медицине и биологии, научно-технических исследованиях
- ▶ Емкости для хранения и транспортировки
- ▶ Метрология и средства измерения при низких температурах
- ▶ Комплектующие, вспомогательное оборудование, системы управления и программное обеспечение
- ▶ Сертификация и технические регламенты в криогенной отрасли
- ▶ Образование и ярмарка вакансий

Деловая программа: 6-я международная научно-практическая конференция: «Криогенные технологии и оборудование. Перспективы развития»

Дирекция выставки:
 115533, Москва, пр-т Андропова, 22 | E-mail: info@mirexpo.ru | Сайт: www.mirexpo.ru
 Тел./факс: 8 499 618-05-65, 8 499 618-36-88, 8 499 618-36-83

ВНИМАНИЕ!
 Заявки на участие в выставке и конференции принимаются до 1 октября 2009 года