

# PROGRAMUL „RG1” PENTRU DETERMINAREA PRINCIPALELOR MĂRIMI TERMODINAMICE ALE GAZELOR REALE

Ș.l. dr. ing. Sorin NEACȘU

UNIVERSITATEA PETROL-GAZE Ploiești

**Anstract.** This work presents the main theoretical elements the RG1 software was built on. RG1 allows determination of the thermodynamic properties for the real gases. The RG1 possibilities are shown as examples for two gases : Propane and Freon R134A.

## 1. INTRODUCERE

Problema evaluării parametrilor de stare în cazul gazelor reale este complicată, cel puțin din două puncte de vedere: ecuațiile de stare au forme complexe, astfel încât impun soluții numerice; sunt necesare date referitoare la proprietățile gazului analizat, care de multe ori se dovedesc greu de găsit. Programe care să rezolve aceste probleme există, dar la prețuri destul de ridicate.

O cale de soluționare a problemelor legate de gazele reale este realizarea unui program. Cerințele pe care am considerat că trebuie să le îndeplinească programul sunt: în funcție de presiune și temperatură să calculeze volumul specific, entalpia, entropia; pentru zona de schimbare de fază parametrii de intrare să fie presiune – titlu sau temperatură – titlu; starea cerută să fie reprezentată în diagrama T-s, iar dacă presiunea punctului solicitat este mai mică decât presiunea critică, să se determine parametrii la saturație,  $v'$ ,  $v''$ ,  $h'$ ,  $h''$ ,  $s'$ ,  $s''$ , corespunzători acestei presiuni; programul să conțină o bază de date cu principalele gaze utilizate în tehnică.

## 2. DETERMINAREA VOLUMULUI SPECIFIC, EN TALPIEI SI ENTROPIEI GAZULUI REAL

Pentru un gaz real volumul specific se poate calcula pe baza factorului de compresibilitate, iar entalpia și entropia se pot calcula utilizând termeni corectivi:

$$- \text{Volumul specific } v = \frac{ZRT}{P}, \text{ unde } Z \text{ este factorul}$$

de compresibilitate;

- Abaterea entalpiei față de starea de gaz perfect

$$\frac{h-h^*}{RT}(p_r, T_r);$$

- Abaterea entropiei față de starea de gaz perfect

$$\frac{s-s^*}{RT}(p_r, T_r).$$

Mărimile definite mai sus se pot calcula funcție de factorul de compresibilitate Z utilizând ecuația de stare Lee-Kesler conform metodologiei prezentate în lucrarea [4].

Pentru calcularea variației de entropie între două stări notate cu 1 și 2 pentru un gaz real, folosim schema din fig. 1. Cu asterisc s-a notat o stare corespunzătoare gazului perfect.

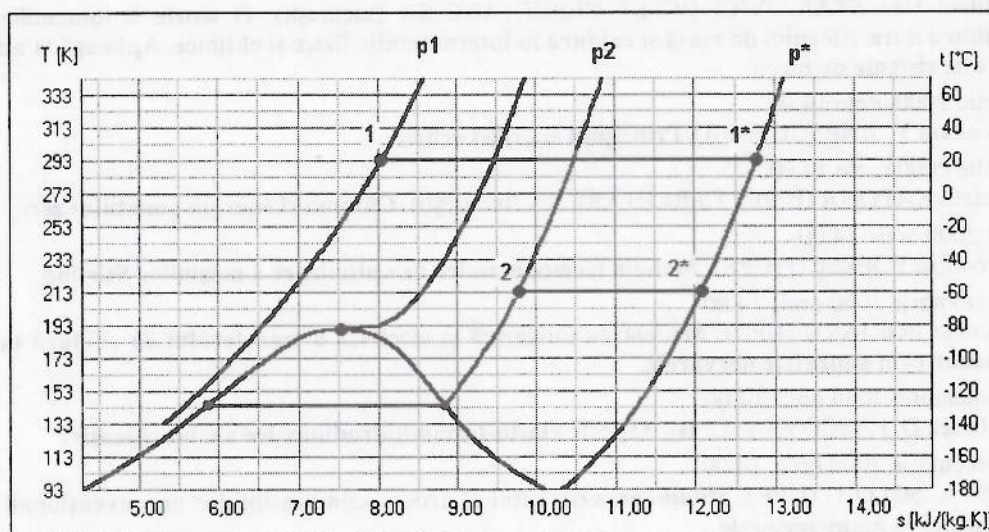


Fig. 1



Deoarece entalpia este o mărime de stare, deci admite o diferențială totală exactă, rezultă că integrala între cele două stări nu depinde de drum, deci putem alege o cale convenabilă. Astfel, pentru a calcula variația de entalpie utilizăm drumul  $1 > 1^* > 2^* > 2$  (fig. 1). Efectuând integrala pe acest drum rezultă:

$$h_2 - h_1 = -(h_2^* - h_2) + (h_2^* - h_1^*) + (h_1^* - h_1) \quad (1)$$

Observăm că în expresia (1) membrul stâng se compune din abaterile entalpiei față de gazul perfect în stările 1 și 2, iar termenul  $h_2^* - h_1^*$  reprezintă variația de entalpie pe o izobară, pentru un gaz perfect, astfel că putem aplica formula:

$$h_2^* - h_1^* = c_p(T_2 - T_1) \quad (2)$$

Pentru entropie procedăm asemănător folosind schema din fig. 2. În acest caz s-au considerat două stări  $1^*$  și  $2^*$  ca fiind stările gazului perfect care are aceeași masă moleculară cu gazul real considerat la presiunile și temperaturile stărilor reale 1 și 2. Deoarece entropia este o mărime de stare, pentru integrarea ei între stările 1 și 2 alegem un drum convenabil:  $1 > 1^* > 2^* > 2$ . Formula pentru acest caz este:

$$s_2 - s_1 = -(s_{p_2, T_2}^* - s_2) + (s_{p_2, T_2}^* - s_{p_1, T_1}^*) + (s_{p_1, T_1}^* - s_1) \quad (3)$$

Observăm că pe lângă termenii ce reprezintă abaterea entropiei gazului real față de stările 1 și 2 apare și variația entropiei pentru un gaz perfect, calculată între stările 1 și 2 cu relația:

$$s_{p_2, T_2}^* - s_{p_1, T_1}^* = c_p \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) - R \ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \quad (4)$$

Termeni corectivi ne permit calcularea variației entalpiei și respectiv a entropiei, printr-o metodă

laborioasă. Trebuie să evaluăm termeni corectivi în cele două stări apoi să calculăm variația pentru satrea de gaz perfect la care adugăm termeni corectivi. Acest lucru ne-a făcut să ne gândim la o metodă de a determina entalpia și entropia pentru un gaz real în valoare absolute. Din structura formulelor (1), (3), se remarcă cu ușurință că pentru a determina o mărime în valoare absolută trebuie să alegem o stare în care cunoaștem valorile reale ale entalpiei și entropiei. Această stare am numit-o satre de referință.

O problemă importantă o constituie zona de schimbare de fază pentru care s-a utilizat o corelație descrisă de [2] funcție de factorul acentric introdus de Pitzer. Astfel presiunea redusă la saturație  $p_{r,s}$  se poate exprima funcție de temperatura redusă, la saturație printr-o relație de forma:

$$-\lg(p_{r,s}) = (-\lg(p_{r,s}))^0 - \omega \left( \frac{\partial p_{r,s}}{\partial \omega} \right) \quad (5)$$

Expresiile termenilor din membrul drept al relației (5) se exprimă funcție de temperatura redusă, conform [2], prin relația 6 relație cu care se obțin rezultate precise pentru substanțele apolare (fluide normale).

$$-\lg p_{r,s} = \left( 3,209 - \frac{4,318}{T_r} + \frac{1,454}{T_r^2} - \frac{0,3456}{T_r^3} \right) + \omega \left( 0,1175 + \frac{2,008}{T_r} - \frac{2,524}{T_r^2} + \frac{0,3981}{T_r^3} \right) \quad (6)$$

Pe baza relației (6) se pot determina curbele limită ale zonei de schimbare de fază. Pentru a obține o precizie ridicată a calculului am folosit expresii corectate funcție de factorul acentric pentru factorul de compresibilitate și pentru termenii corectivi. În majoritatea lucrărilor de specialitate se consideră o variație liniară a mărimilor respective funcție de factorul acentric.

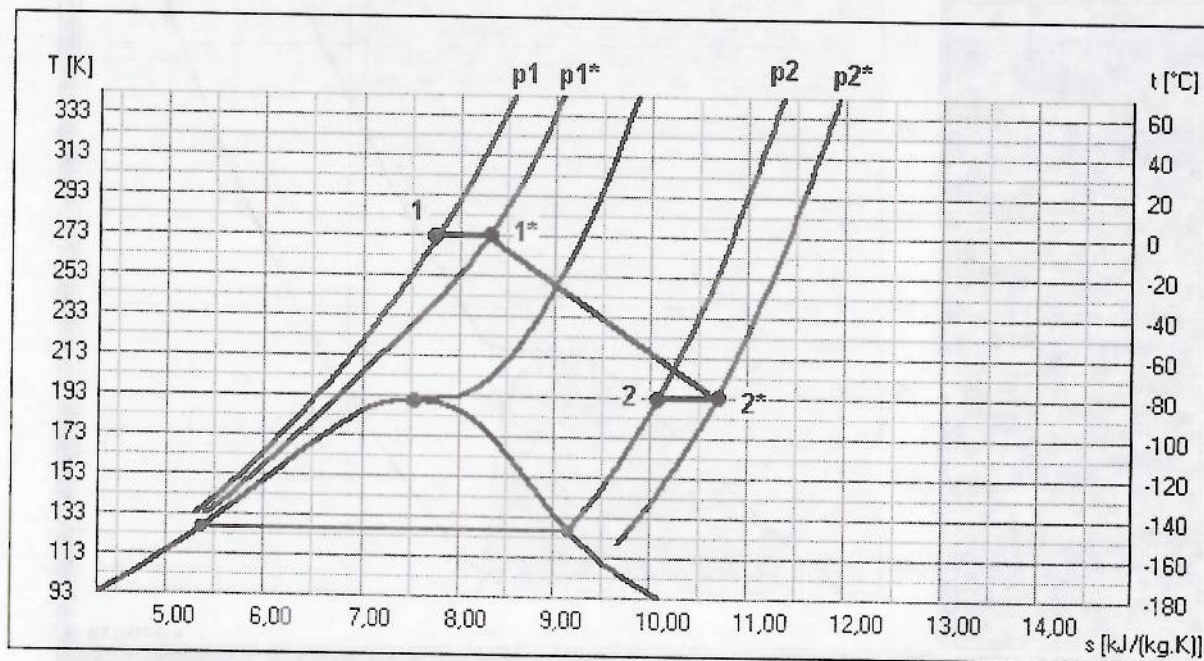


Fig. 2



$$Z = Z^{(0)}(p_r, T_r) + \omega Z^{(1)}(p_r, T_r) \quad (7)$$

$$\frac{h^* - h}{RT_c} = \left( \frac{h^* - h}{RT_c} \right)^{(0)}(p_r, T_r) + \omega \left( \frac{h^* - h}{RT_c} \right)^{(1)}(p_r, T_r) \quad (8)$$

$$\frac{s^* - s}{R} = \left( \frac{s^* - s}{R} \right)^{(0)}(p_r, T_r) + \omega \left( \frac{s^* - s}{R} \right)^{(1)}(p_r, T_r) \quad (9)$$

În expresiile de mai sus cu exponentul (0) s-a notat valoarea de referință iar cu exponentul (1) corecția de ordinul unu. Pentru cazul utilizării ecuației lui Lee-Lesler. Aceste corecții se pot aplica atât pe curbele de saturație unde influența factorului acentric este majoră cât și în afara acestora.

### 3. CONSIDERAȚII PRIVIND REALIZAREA PROGRAMULUI

Pe baza relațiilor menționate mai înainte se pot determina volumul specific, entalpia și entropia unui gaz real dacă se cunosc factorul de compresibilitate și

termenii corectivi, la acestea trebuie să mai adugăm date pentru starea de referință în care trebuie cunoscute explicit entalpia și entropia.

Nucleul de bază al programului l-au constituit bibliotecile programului Z ce permit calcularea pe curbele de saturație și în afara acestora a mărimilor ce ne interesează, aplicând totodată și corecția funcție de factorul acentric.

Am considerat că este utilă reprezentarea punctului solicitat în diagrama T-s, lucru ce ne-a determinat să realizăm o interfață grafică adecvată. Pentru ușurința exploataării programului am organizat datele disponibile în meniuri ușor accesibile. Solicitarea valorilor unei stări se poate face funcție de poziția acesteia față de curbele de saturație. Dacă este în afara acestei zone starea trebuie precizată prin presiune și temperatură. Dacă starea se găsește pe curbele de saturație sau în interiorul zonei de schimbare de fază ea poate fi definită în două moduri: prin definirea presiunii și titlului sau a temperaturii și a titlului.

În urma cererii programul calculează parametrii stării solicitate afișând mărimile caracteristice stării respective și desenează în diagrama T-s punctul corespunzător (fig. 3). Dacă presiunea punctului este mai mică sau egală cu presiunea critică, programul afișează suplimentar mărimile corespunzătoare punctelor de intersecție a izobarei stării solicitate cu curbele limită.

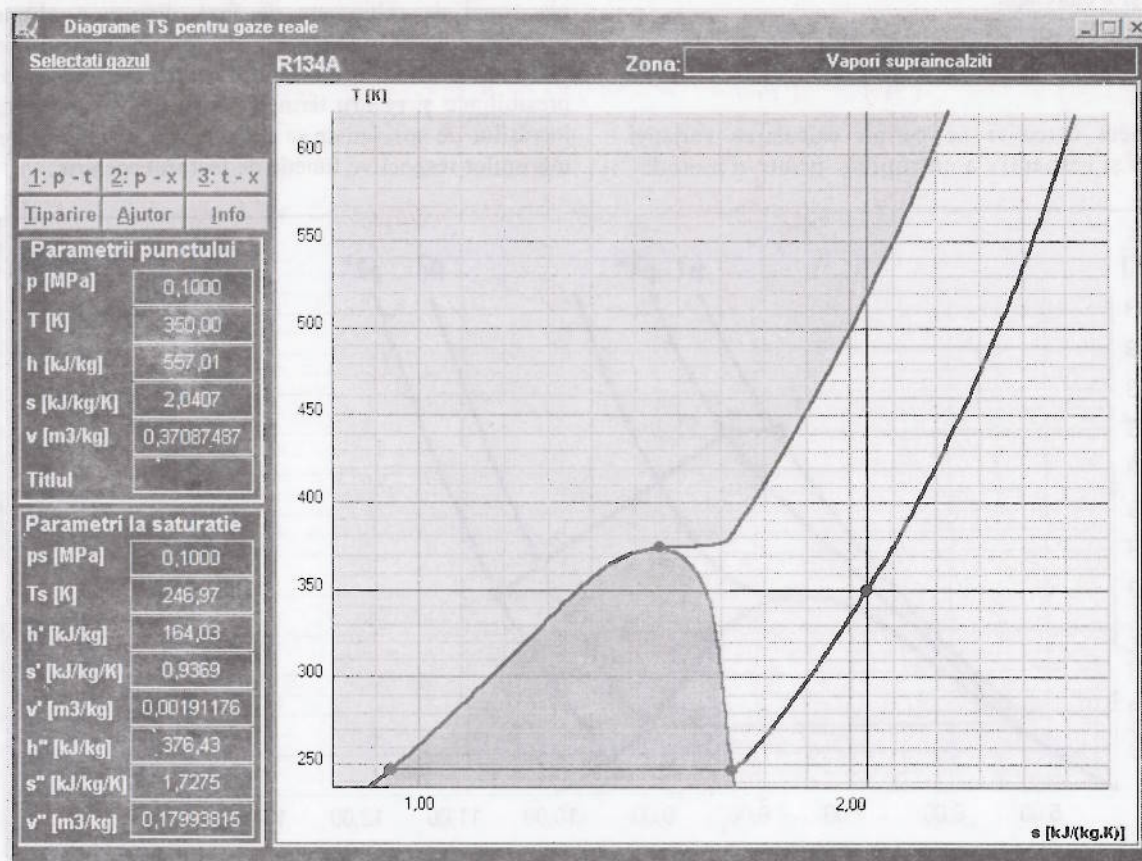


Fig. 3



Valori calculate cu programul RG 01

© Sorin Neacșu

**DATE INTRARE**

Gazul: Propan  $p$  [MPa] = 2,50000; Titlu = 0,1000

**REZULTATE**

Entalpia  $h$  [kJ/kg] = 90,33  
 Entropia  $s$  [kJ/(kg.K)] = 4,8920  
 Volum specific  $v$  [m<sup>3</sup>/kg] = 0,00386402

**VALORI LA SATURATIE**

$T$  la saturatie [K] = 341,61  
 $p$  la saturatie [MPa] = 2,5000  
 Entalpie lichid saturat  $h_p$  [kJ/kg] = 67,65  
 Entalpie gaz saturat  $h''$  [kJ/kg] = 294,47  
 Entropie lichid saturat  $s'$  [kJ/(kg.K)] = 4,8262  
 Entropie gaz saturat  $s''$  [kJ/(kg.K)] = 5,4841  
 Volum specific lichid saturat  $v'$  [m<sup>3</sup>/kg] = 0,00259353  
 Volum specific gaz saturat  $v''$  [m<sup>3</sup>/kg] = 0,01529845

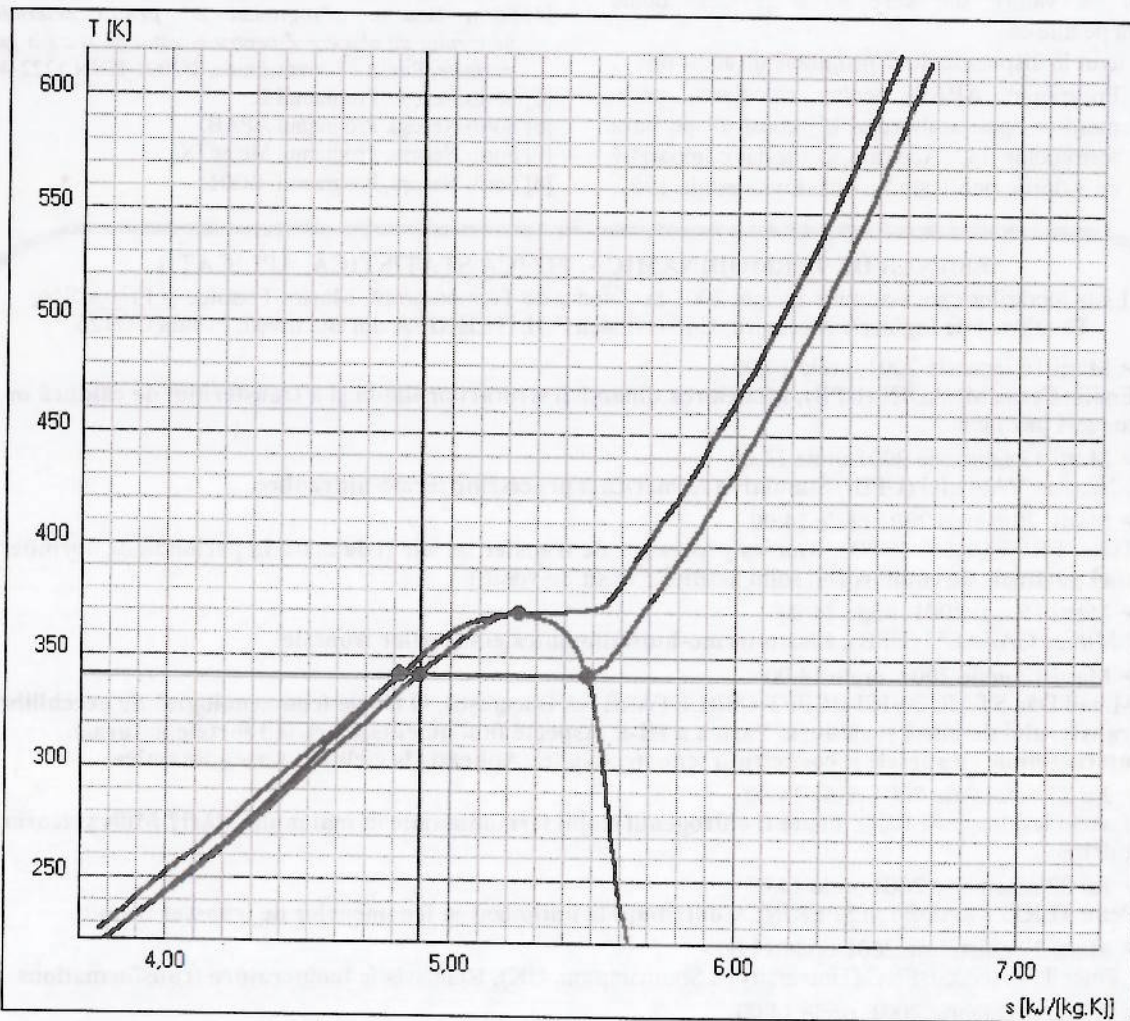


Fig. 4



O opțiune utilă poate fi accesată prin apăsarea butonului de tipărire. Programul tipărește rezultatele sub forma unui buletin în care, pe lângă valorile numerice ale stării solicitate, este disponibil un grafic cu reprezentarea punctului în diagrama T-s (fig. 4).

Programul mai are câteva facilități din care amintim prezentarea explicită a fiecărei zone sau curbe reprezentate în diagrama T-s prin simpla poziționare a mouse-ului pe aria respectivă din diagramă.

Gazele reale a căror date sunt disponibile în programul RG1 sunt grupate pe trei categorii:

- Gaze reale: Amoniac, Monoxid de carbon, Dioxid de carbon, Azot, Oxigen;
- Hidrocarburi: Acetilenă, Benzen, nButan, Etan, Etilenă, nHexan, Propan, Propenă;
- Freoni: R12, R22, R134A

## 5. VERIFICAREA PROGRAMULUI

Un lucru important îl constituie încrederea în rezultatele furnizate de program. Deoarece programul RG1 permite calcularea, pentru un gaz real, a parametrilor de stare dintr-un domeniu larg ce include și zona transformării de fază, pentru verificarea lui a trebuit să utilizez alte programe comparabile ca domeniu de valori, dar care au o precizie bună, verificată pe alte căi.

Am avut la dispoziție două programe de acest tip:

- Programul APAB pentru calcularea parametrilor apei și aburului [5] construit pe baza formulelor IFC. Acesta a fost testat comparativ cu valorile publicate în Vukalovici ediția 1967,

constatându-se o eroare maximă de 0,2% pe întreg domeniul.

- Programul MetanTS [6] pentru calcularea parametrilor de stare ai metanului. Valorile din program au fost comparate cu valorile publicate în lucrarea [1], rezultând o eroare maximă de 0,7% pe întreg domeniul.

Testele făcute între programul RG1 și cele două menționate mai sus au condus la o eroare maximă de 4,5% pe întreg domeniul, acceptabilă din punct de vedere tehnic și - având în vedere că valorile obținute cu RG1 pentru un gaz real sunt generate plecând de la o stare de referință și de la parametrii punctului critic - rezultatele le considerăm mulțumitoare. Erorile minime sunt realizate pe curbele de saturație și în vecinătatea acestora iar cele maxime la limitele domeniului.

## BIBLIOGRAFIE

- [1] Gordon V.W, Sonntag R., Borgnakke C., *Fundamentals of classical Thermodynamics*, Jon Wiley & Sons, New York, 1994.
- [2] Vidal J., *Thermodynamique - Methodes appliquees au raffinage et au genie chimique*, Edition Techniq, Paris, 1973.
- [3] Marinescu M., Băran N, Radcenco V., *Termodinamică tehnică*, MatrixRom, București, 1998.
- [4] Sorin Neacșu, „Programul Z” pentru determinarea factorului de abatere Z pentru ecuația de stare a gazelor perfecte, *Revista Termotehnica*, 1/2001-ISSN 1222-4957.
- [5] Sorin Neacșu, Programul Z.
- [6] Sorin Neacșu, Programul APAB.
- [7] Sorin Neacșu, Programul MetanTS.
- [8] Sorin Neacșu, Programul RG01.

## SEMINAR DE TERMODINAMICĂ, FIZICĂ STATISTICĂ, APLICAȚII

Lista lucrărilor care s-au ținut în anul 2001 la Catedra de Termotehnică, Mașini Termice și Frigorifice, Facultatea de Inginerie Mecanică, Universitatea POLITEHNICA din București, în sala CG125

➤ Marți 16 ianuarie 2001 orele 14.00

Dr. Emilia Cerna MLADIN (UPB), **Modelarea dinamicii straturilor limită și a transferului de căldură în curgeri paralele**

➤ Marți 13 februarie 2001 orele 14.00

Prof. Nicolae VASILIU (UPB), **Simularea numerică a proceselor termo-hidraulice**

➤ Marți 20 martie 2001 orele 14.00

Dr. Tudor PRISECARU (UPB), **Analiza proceselor de transfer termic și de masă în perioada de aprindere a unei particule de combustibil solid artificial lipsit de volatili**

➤ Marți 15 mai 2001 orele 14.00

Prof. Mircea CAZACU (UPB), **Elasto-termo-hidrodinamica etanșărilor frontale**

➤ Marți 12 iunie 2001 orele 14.00

Dr. Mihail Dan STAICOVICI (ICPET CERCETARE SA București), **O teorie fenomenologică de neechilibru a transferului de masă și căldură. Partea a III-a. Aspecte fundamentale privind forțele naturale, interacțiunile cu sursele și coeficienții fenomenologici. Aplicație la ciclurile termodinamice**

➤ Joi 25 octombrie 2001 orele 14.00

Fiz. Laszlo Katona (SPERIN), **Poate fi hidrogenul stabil termodinamic în mai multe stări? Mills și teoria hidrino**

➤ Joi 22 noiembrie 2001 orele 14.00

Dr. Petre TERZI ( RADET și SPERIN), **Contribuții la optimizarea fenomenelor de transfer termic**

➤ Marți 27 noiembrie 2001 orele 14.00

Prof. Peter T. LANDSBERG (University of Southampton, UK), **Relativistic temperature transformations**

➤ Joi 20 decembrie 2001 orele 14.00

Dr. Monica COSTEA (UPB), **Aspecte ale optimizării termodinamice a proceselor dintr-un reactor chimic folosind termodinamica ireversibilă**