

УДК 620.193

СИСТЕМА АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ТЕСТИРОВАНИЯ БАЗЫ ДАННЫХ ПО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ

С.Б. Коныгин, Д.В. Коноваленко

Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Аннотация. Рассмотрены вопросы автоматизированного тестирования базы данных по теплофизическим свойствам химических веществ. Предложен набор простых критериев, позволяющих снизить количество ошибок в значениях постоянных и температурно-зависимых параметров химических компонентов. Рассмотренная система тестирования была реализована в программной платформе для моделирования и расчета процессов и аппаратов «МиР ПиА». Проведено тестирование работы предлагаемой системы, которое в целом показало целесообразность ее использования. Установлено, что для очень легких химических компонентов могут наблюдаться ошибки при оценке корректности ацентрического фактора. Для тяжелых углеводородных компонентов проблематично проведение оценки значений стандартной плотности жидкости.

Ключевые слова: тестирование базы данных, теплофизические свойства веществ, моделирование технологических процессов.

Одной из составляющих современных программных продуктов, предназначенных для моделирования технологических процессов нефтегазовой и химической промышленности, является база данных со свойствами химических веществ [1]. Такие базы данных, как правило, содержат большое количество компонентов, и каждый из них характеризуется широким набором теплофизических свойств (как постоянных, так и зависящих от температуры). В силу того, что указанные данные собираются из различных литературных источников [2–4], возможно возникновение ситуации, когда они будут противоречить друг другу. В этой связи для разработчиков подобных программных продуктов может представлять интерес система автоматизированной проверки корректности параметров химических веществ.

В рамках настоящей статьи рассматривается простая система проверки, которая была реализована для тестирования базы программной платформы для моделирования и расчета процессов и аппаратов «МиР ПиА» [1]. Диалоговые окна для ввода постоянных и температурно-зависимых свойств представлены на рис. 1 и 2. Для автоматизированной проверки предлагается использовать следующие основные критерии:

1) значения критических температуры T_C , давления P_C , объема V_C и сжимаемости z_C должны быть связаны между собой соотношением

Сергей Борисович Коныгин (д.т.н., доцент), заведующий кафедрой «Машины и оборудование нефтегазовых и химических производств».

Денис Владимирович Коноваленко, старший преподаватель кафедры «Машины и оборудование нефтегазовых и химических производств».

$$\left| z_c - \frac{P_c V_c}{RT_c} \right| < \varepsilon_c ; \quad (1)$$

2) значение ацентрического фактора химического компонента ω должно соотноситься с его температурной зависимостью давления насыщенного пара $P_{\text{нп}}$ следующим образом [2]:

$$\left| \omega - \log_{10} \frac{P_c}{P_{\text{нп}}(0,7 \cdot T_c)} + 1 \right| < \varepsilon_\omega ; \quad (2)$$

3) значение температуры кипения $T_{\text{кип}}$ также должно соотноситься с температурной зависимостью давления насыщенного пара $P_{\text{нп}}$ следующим образом [2]:

$$|T^* - T_{\text{кип}}| < \varepsilon_T, \quad (3)$$

где T^* определяется численным решением уравнения

$$P_{\text{нп}}(T^*) = 101325; \quad (4)$$

4) температурные зависимости энтальпии $H_{\text{ид}}$ и энтропии $S_{\text{ид}}$ идеального газа должны удовлетворять соотношению

$$\left| \frac{dH_{\text{ид}}}{dT}(0,5 \cdot T_c) - 0,5 \cdot T_c \frac{dS_{\text{ид}}}{dT}(0,5 \cdot T_c) \right| < \varepsilon_H ; \quad (5)$$

5) значение стандартной плотности жидкости $\rho_{\text{ст}}$ должно соответствовать температурной зависимости плотности жидкости ρ следующим образом:

$$|\rho(298) - \rho_{\text{ст}}| < \varepsilon_\rho. \quad (6)$$

В формулах (1)–(6) значения погрешностей ε_i зависят от классов химических веществ.

	Свойство компонента	Значение	Единицы измерения	Лит
1	Название компонента	1,1-Диметилциклопентан		...
2	Альтернативное название			...
3	Химическая формула	C7H14		...
4	Группы веществ			...
5	Молекулярная масса	98.186	г/моль	...
6	Температура кипения	87.85	С	...
7	Стандартная плотность жидкости	758.57	кг/м3	...
8	Стандартная энтальпия образования	-1720.48	Дж/моль	...
9	Стандартная энергия Гиббса образования	33425.8	Дж/моль	...
10	Ацентрический фактор	0.27235		...
11	Критическая температура	273.85	С	...
12	Критическое давление	3445.03	кПа	...
13	Критический объем	0.00036	м3/моль	...
14	Критическая сжимаемость	0.273		...
15	Температура тройной точки	-69.79	С	...

Рис. 1. Диалоговое окно для ввода констант химических компонентов

Предлагаемая система проверки была реализована в виде программного модуля и апробирована на базе компонентов программной платформы «МиР ПиА». Пример диалогового окна, в котором отображаются результаты тестирования базы данных, приведен на рис. 3.

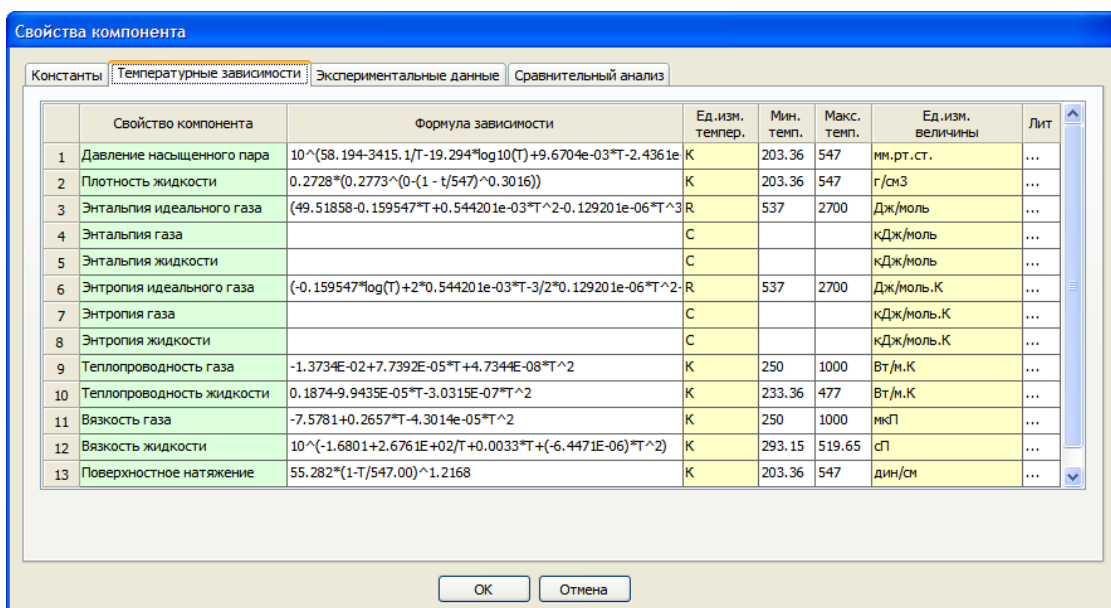


Рис. 2. Диалоговое окно для ввода свойств химических компонентов, зависящих от температуры

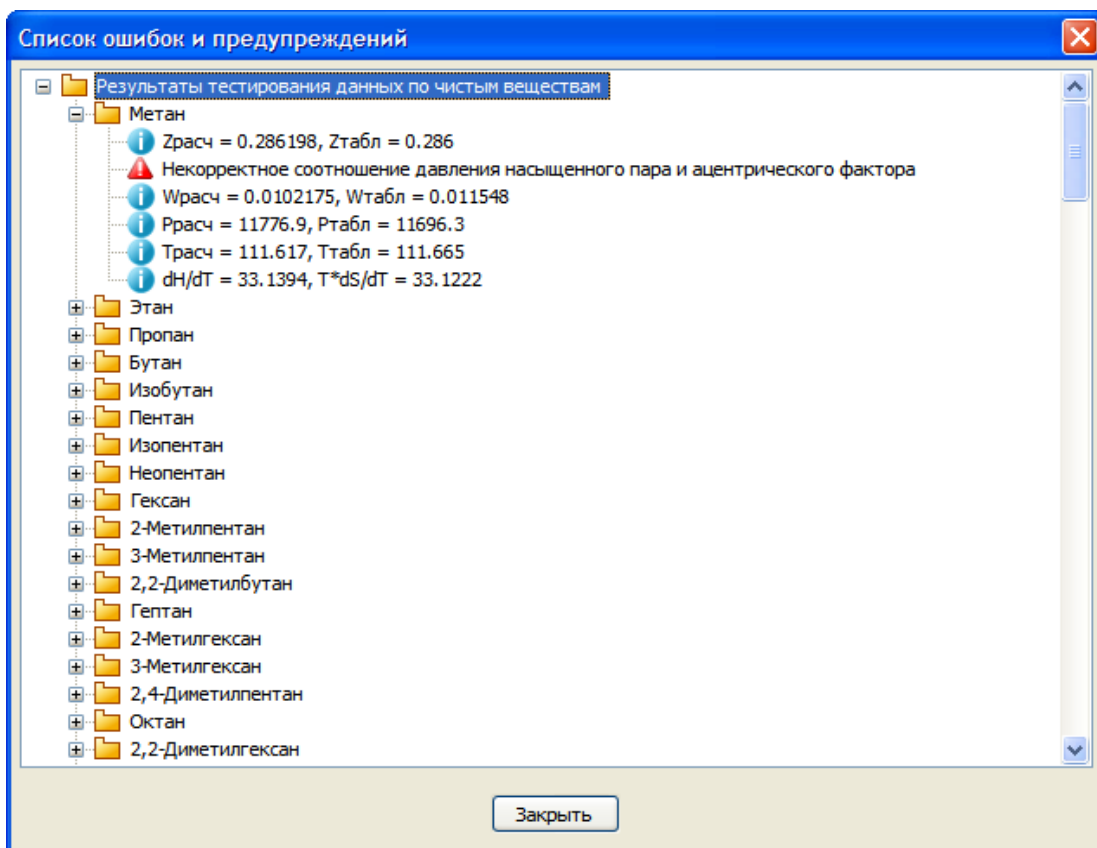


Рис. 3. Диалоговое окно с результатами тестирования базы химических компонентов

На момент тестирования база данных содержала порядка ста химических веществ, основную часть которых составляли углеводороды. Кроме того, в базе присутствовали инертные и легкие полярные газы.

Опыт тестирования базы данных показал следующие основные результаты:

1) для углеводородных компонентов с не слишком большими молекулярными массами (за исключением метана) все автоматические тесты выполняются и позволяют в любой момент проверить корректность параметров;

2) для очень легких компонентов (водород, азот, метан и т. п.) проверить значение ацентрического фактора по формуле (2) не удается;

3) для тяжелых углеводородов проверка стандартной плотности жидкости по формуле (6) невозможна, т. к. при данных условиях вещество еще находится в твердой фазе.

Все сказанное позволяет сделать вывод о целесообразности внедрения подобных средств автоматизированного тестирования в программные продукты для моделирования технологических процессов нефтегазовой и химической отрасли.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Коныгин С.Б., Крючков Д.А. Моделирование и расчет процессов и аппаратов (МиР ПиА). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015613176.
2. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии. Т. 1. – М.: Мир, 1987. – 304 с.
3. Гуревич Г.Р., Брусиловский А.И. Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойств газоконденсатных смесей. – М.: Недра, 1984. – 264 с.
4. Термодинамика равновесия жидкость – пар / Под. ред. А.Г. Морачевского. – Л.: Химия, 1989. – 344 с.
5. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Старс, 2006. – 720 с.

Статья поступила в редакцию 28 января 2018 г.

AUTOMATED TESTING SYSTEM FOR THE DATABASE CONTAINS THE COMPONENTS THERMOPHYSICAL PROPERTIES

S.B. Konygin, D.V. Konovalenko

Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation

Abstract. *The paper deals with the problems of automated testing system of database according to the thermophysical properties of chemicals. An offered set of simple criteria allows to decrease the errors in constant and temperature-dependent parameters of chemicals. This system was realized in the program platform for modeling and calculation of the processes and devices (“MiR PiA”). The testing of this system showed the feasibility of its use. Some errors can occur on the acentric factor for the light chemicals. The assessment of the standard liquid density for the heavy hydrocarbons is problematic.*

Keywords: *database testing, thermophysical properties of chemical components, modeling of technological processes.*

*Sergey B. Konygin, Doctor of Technical Sciences, Head of Department.
Denis V. Konovalenko, Senior Lecturer.*