

**А. И. Мирошниченко**  
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)  
Науч. рук. **Е. А. Дей**, канд. физ.-мат. наук, доцент

## РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ НА ЯЗЫКЕ PYTHON

В отличие от идеального газа, поведение которого описывается простым уравнением для одного моля  $PV=RT$ , реальные газы проявляют более сложное поведение, особенно при высоких давлениях и низких температурах. Данная программа представляет собой удобный инструмент с графическим интерфейсом для расчета и визуализации свойств реальных газов на основе двух популярных уравнений: Ван-дер-Ваальса и Редлиха-Квонга.

Уравнение Ван-дер-Ваальса [1] – одно из первых и наиболее простых уравнений, учитывающих специфику реальных газов. Оно имеет вид

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT, \quad (1)$$

где  $P$  – давление;

$V$  – молярный объем (объем одного моля);

$T$  – абсолютная температура;

$R$  – универсальная газовая постоянная.

Константа  $a$  учитывает силы притяжения между молекулами, а константа  $b$  – собственный объем молекул. Эти константы специфичны для каждого газа. Константы  $a$ ,  $b$  выражаются через параметры критического состояния газа, кроме того, их значения приводятся в справочниках.

Уравнение Редлиха-Квонга [1] было предложено как более точное двухпараметрическое уравнение по сравнению с уравнением Ван-дер-Ваальса, особенно хорошо описывающее поведение газов вблизи критической точки. Оно имеет вид

$$\left(P + \frac{a}{T^{1/2}V(V+b)}\right)(V - b) = RT. \quad (2)$$

где  $a$  и  $b$  – константы, специфичные для газа, но их значения отличаются от констант Ван-дер-Ваальса. Значения этих констант можно получить на основании справочных данных для параметров критического состояния выбранного газа

$$a = \frac{1}{9\xi} \frac{R^2 T_{кр}^{5/2}}{P_{кр}}; \quad b = \frac{\xi}{3} \frac{RT_{кр}}{P_{кр}}; \quad \xi = \sqrt[3]{2} - 1. \quad (3)$$

Программа разработана на языке Python с использованием библиотеки Tkinter для создания графического интерфейса [2]. Интерфейс разделен на две основные части:

1. Левая панель: Содержит общие параметры, применимые к различным расчетам:
  - выбор газа (например,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO_2$ ) из предопределенного списка;
  - поля для ввода массы газа и его молярной массы, на основе которых рассчитывается количество вещества (в молях);
  - выбор уравнения состояния (Ван-дер-Ваальса или Редлиха-Квонга) для расчетов.
2. Правая часть окна (вкладки Notebook) организует функционал программы по вкладкам.

Вкладка «Основная» позволяет рассчитать любой один из трех основных термодинамических параметров (давление  $P$ , объем  $V$  или температура  $T$ ) при заданных двух других. Пользователь выбирает, какой параметр нужно рассчитать, и программа динамически отображает поля для ввода двух оставшихся параметров. После ввода данных и нажатия кнопки «Рассчитать» выводится результат.

Для расчета объема или температуры по этим уравнениям при заданных других параметрах программа использует численные итерационные методы, поскольку уравнения являются нелинейными относительно  $V$  и  $T$ .

Вкладка «Таблица» предназначена для генерации таблицы значений. Пользователь выбирает один параметр, который будет изменяться в заданном диапазоне с определенным шагом, и второй параметр, который будет оставаться постоянным. Третий параметр рассчитывается для каждой точки диапазона. Результаты представляются в виде таблицы (рисунок 1).

Рисунок 1 – Вид окна программы для выбора газа, уравнения и ввода параметров состояния газа в режиме «Таблица»

Вкладка «График» позволяет визуализировать зависимости между параметрами в виде графиков, используя библиотеку Matplotlib. Функционал ввода параметров аналогичен вкладке «Таблица», но вместо таблицы строится график.

Еще одна вкладка «Приведенные переменные» используется для выполнения расчетов и построения графиков с использованием уравнений состояния, записанных в так называемых приведенных безразмерных переменных:

$$\tilde{V} = \frac{V}{V_{кр}}; \quad \tilde{P} = \frac{P}{P_{кр}}; \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_{кр}}. \quad (4)$$

В приведенных переменных уравнение Ван-дер-Ваальса и Редлиха-Квонга имеют вид [3]

$$\left( \tilde{P} + \frac{3}{\tilde{V}^2} \right) (3\tilde{V} - 1) = 8\tilde{T}; \quad \left( \tilde{P} + \frac{1}{\xi \tilde{T}^{1/2} \tilde{V} (\tilde{V} + \xi)} \right) (\tilde{V} - \xi) = 3\tilde{T}. \quad (5)$$

Уравнения в приведенных переменных являются универсальными и описывают поведение многих термодинамически подобных по свойствам реальных газов.

Вкладка «Приведенные переменные» является мощным инструментом для визуального анализа поведения реальных газов.

Для получения нужного графика выполняется выбор параметров, например: «Постоянный параметр»:  $T$ , «Значение постоянного параметра (для  $T$ )»: 3, «Изменяющийся параметр»:  $V$ , «Начальное значение» (для  $V$ ): например, 0.5, «Конечное значение» (для  $V$ ): например, 5.0, «Число шагов»: например, 100 и нажимается кнопка «Построить график».

Программа выполнит расчеты давления для каждого значения объема в заданном диапазоне при постоянной температуре, используя формулы, полученные из каждого уравнения. Затем откроется новое окно с графиком. На этом графике выводятся две кривые: одна будет соответствовать уравнению Ван-дер-Ваальса, другая – уравнению Редлиха-Квонга. По оси  $X$  будет отложен Объем ( $V$ ), а по оси  $Y$  – Давление ( $P$ ). График наглядно покажет, как изменяется давление газа при изменении его объема при фиксированной температуре, и позволит сравнить предсказания двух разных уравнений состояния.

На рисунке 2 показаны графики изотерм реальных газов в приведенных переменных для обоих уравнений при значении  $\tilde{T}=1$ . Выполняется совпадение значений в точке критического состояния ( $\tilde{T}=1, \tilde{V}=1, \tilde{P}=1$ ). При этом слева по графику от значения  $\tilde{V}=1$  большее значение  $\tilde{P}$  получается из уравнения Ван-дер-Ваальса, а справа – из уравнения Редлиха-Квонга. При других значениях  $\tilde{T}$  наблюдается аналогичная ситуация относительно некоторого значения  $\tilde{V}$  (рисунок 3).

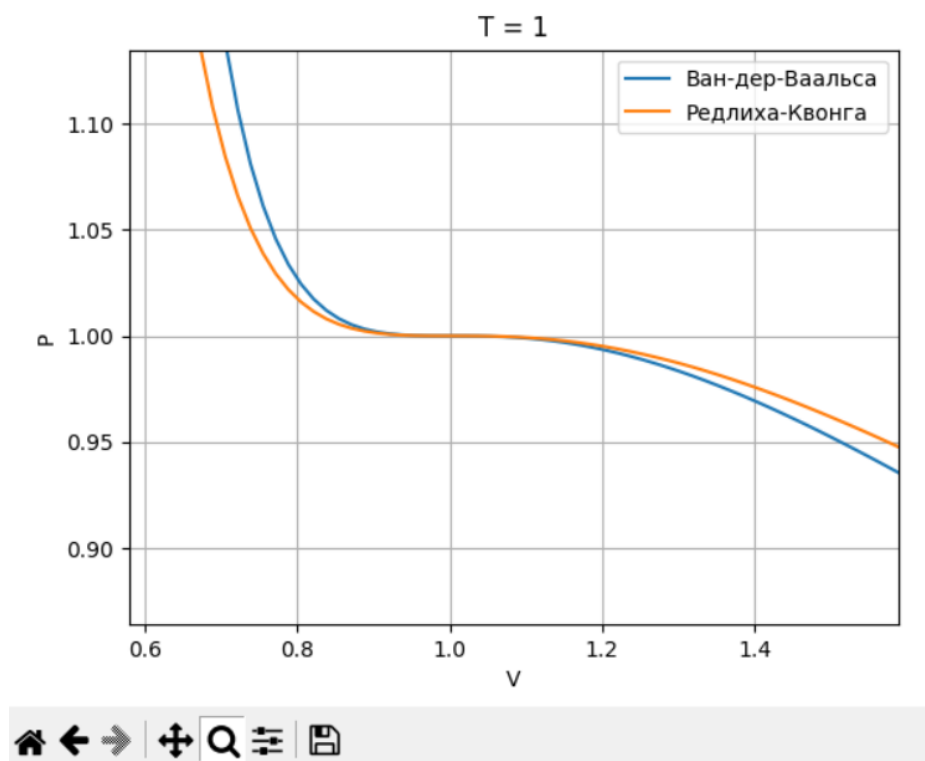


Рисунок 2 – Изотермы реальных газов в приведенных переменных при значении  $\tilde{T} = 1$

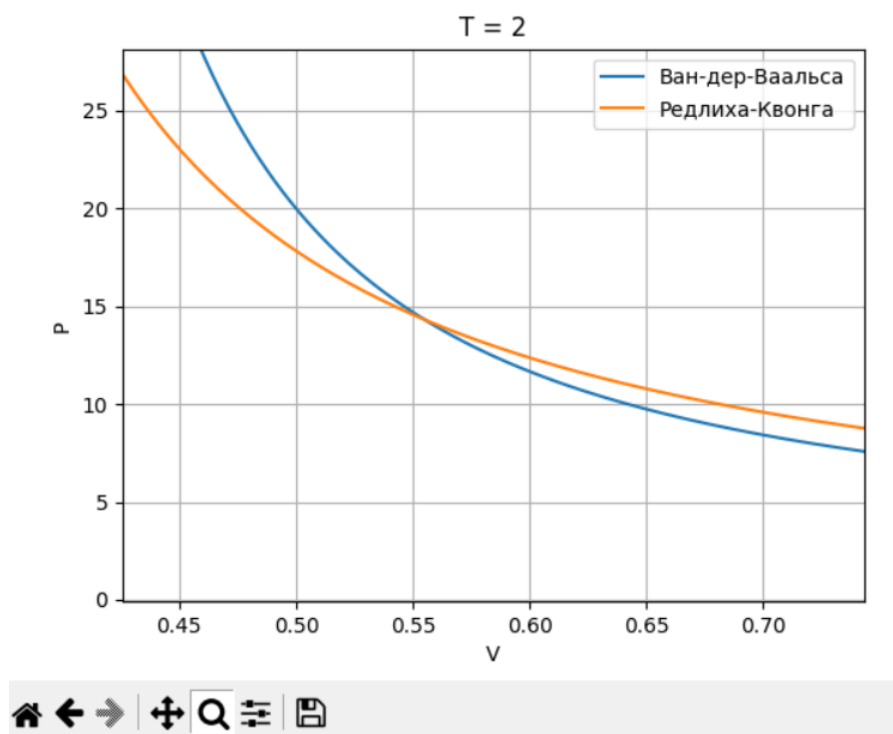


Рисунок 3 – Изотермы реальных газов в приведенных переменных при значении  $\tilde{T} = 2$

### Литература

1. Румер, Ю. Б. Термодинамика, статистическая физика и кинетика / Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин. – 2-е изд. – Новосибирск : Изд-во Новосиб. ун-та, 2000. – 608 с.
2. Прядко, С. А. Применение модулей языка Python в инженерных расчетах : учебное пособие / С. А. Прядко, А. С. Фомочкина, Т. М. Папилина. – М. : РГУ нефти и газа имени И. М. Губкина, 2021. – 140 с.
3. Дей, Е. А. Применение приведенных переменных в задачах аналитической термодинамики / Е. А. Дей, Г. Ю. Тюменков // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины, № 6 (141), 2023. – С. 104–109.