**Умеренкова Ксенія Ростіславівна. Математичне моделювання фазових рівноваг у вуглеводневих та металогідридних робочих тілах теплотехнічних пристроїв: дисертація канд. техн. наук: 05.14.06 / НАН України; Інститут проблем машинобудування ім. А.М.Підгорного. - Х., 2003**

|  |  |
| --- | --- |
| |  | | --- | | Умеренкова К.Р. Математичне моделювання фазових рівноваг у вуглеводневих та металогідридних робочих тілах теплотехнічних пристроїв. – Рукопис.  Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.14.06 – технічна теплофізика та промислова теплоенергетика. – Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України. – Харків, 2003.  Дисертація присвячена розробці методик визначення параметрів фазових рівноваг робочих тіл вуглеводневого та металогідридного типів, які використовуються в теплотехнічних пристроях. Подано опис розроблених математичних моделей рівноваг рідина–пара в багатокомпонентних молекулярних сумішах та фазових діаграм металогідридів невпорядкованих фаз. Математичні моделі фазових рівноваг та їх числові реалізації грунтуються на єдиному статистико–механічному підході в рамках термодинамічної теорії збурень без використання емпіричних параметрів. Запропонованi процедури редукції загальної системи розрахунку ФР у вуглеводневих робочих тілах, попереднього визначення фазового стану та оцінки початкових значень параметрів, що значно скорочує обсяг обчислення. Адекватнiсть запропонованих математичних моделей ФР та достовірність одержаних в дисертації результатів підтверждується задовiльним погодженням розрахункових та експериментальних фазових діаграм вуглеводневих систем та металогідридів. | |
| |  | | --- | | 1. На основі аналізу існуючих в літературі методик розрахунку ФР у вуглеводневих та металогідридних робочих тілах теплотехнічних пристроїв зроблено висновок про те, що різноманітні модельні схеми та емпіричні рівняння дають в основному або якісний опис ФР, або кількісні результати, що не задовольняють потреби сучасних практичних завдань.  2. В дисертації наведено теоретичне узагальнення та нове вирішення задачі математичного моделювання ФР в робочих тiлах теплотехнічних пристроїв, що належать до широкого класу вуглеводневого та металогідридного типів і застосовуються у різних галузях техніки. Побудова математичної моделі ФР та її числова реалізація грунтуються на єдиному статистико-механічному підході у межах методу термодинамічної теорії збурень за відсутності емпіричних параметрів.  3. Розроблені процедури редукції загальної системи рівнянь розрахунку ФР у вуглеводневих багатокомпонентних сумішах, попереднього визначення фазового стану та оцінки початкових значень параметрів ФР значно скорочують обсяг обчислення у межах запропонованої математичної моделі.  4. Аналітичні вирази для параметрів різнорідних міжмолекулярних взаємодій, отримані в роботі, забезпечують можливість застосування математичної моделі ФР для широкого спектра робочих тіл вуглеводневого типу в будь-яких практично значущих діапазонах станів (тиску – до 1000 МПа, температури – до 5000 K або до температур піролізу).  5. Фізична обгрунтованість і адекватність запропонованих розрахункових схем у поєднанні із застосуванням сучасних числових математичних методів та засобів, підтверджена добрим узгодженням розрахункових і експериментальних даних, також свідчить про вірогідність одержаних результатів та висновків.  6. Успішне моделювання фазових переходів між невпорядкованими a, b(a)-фазами металогідридів досягнуто в роботі шляхом використання єдиного методу МТЗ для опису термодинамічної поведінки неідеального решіткового газу атомарного водню та молекулярної фази Н2.  7. Урахування для водневої підсистеми прямої взаємодії Н-атомів та дилатації металевої матриці під час поглинання водню дозволяє отримати аналітичні РСТ–залежності як для двофазних, так і гомогенних фазових полів, в тому числі у закритичній області. Ці залежності добре відтворюють особливості фазових діаграм МГ в діапазоні тисків Н2 , що складає не менше 6 порядків.  8. Розроблені математичні моделі ФР у вуглеводневих та металогідридних робочих тілах теплотехнічних пристроїв мають практичну цінність при проведенні різноманітних науково-дослідних робіт в галузях енергетики, машинобудування, кріогенної техніки та ін. Комп’ютерні модулі, створені на базі математичних моделей, забезпечують отримання оперативної інформації про процеси, що відбуваються у реальному часі. Математичне моделювання дало змогу обмежити чи виключити дорогі та довготривалі експериментальні дослідження. | |