

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРОВ

**С.Б. Коновалов, И.В. Тявкин,
В.М. Тютюнник**

*Международный Информационный
Нобелевский Центр (МИНЦ)
vmt@tmb.ru*

Водно-спиртовые растворы являются очень сложными и недостаточно изученными системами. Их физическим свойствам присущи многие особенности, причины которых еще не получили объяснения. В зависимости от их состава и внешних условий в них происходят различные ассоциативные процессы, благодаря которым устанавливаются определенные связи между отдельными одинаковыми молекулами воды и спирта, образуются комплексы разнородных молекул, а также устанавливается взаимодействие между этими комплексами и отдельными молекулами воды и спирта [3].

При изменении состава раствора и внешних условий — температуры, давления — происходят перегруппировки ассоциатов, изменяется прочность различных связей, что является причиной изменения физических свойств системы [4].

Плотность водно-спиртовых растворов зависит не только от состава компонентов, но и от температуры. При этом спирт и вода изменяют свой объем при изменении температуры не в одинаковой степени [2].

Изучению плотности жидкого этилового спирта посвятил ряд своих работ

Д.И. Менделеев. Полученные им данные о плотности этилового спирта и его водных растворов в большинстве стран мира до сих пор положены в основу спиртомерных таблиц. Эти таблицы многократно расширялись в нескольких направлениях. В настоящее время таблицы содержат данные по зависимости значений плотности водно-спиртовых растворов от их крепости и температуры. Плотность определена с точностью до пятого знака после запятой, а крепость и температура ограничена целыми значениями [2, 5].

Первоначально, следуя традиционному подходу, решалась задача расширения значений крепости и температуры водно-спиртовых растворов до сотых путем нахождения оптимальных коэффициентов двухпараметрической аппроксимации. При этом аппроксимация проведена уравнениями с первого до пятого порядка. Точность значений коэффициентов ограничивалась восьмым порядком. Проведены расчеты значений плотности водно-спиртовых растворов при различных значениях крепости и температуры. Полученные значения сравнивались со значениями плотности по водно-спиртовым таблицам и рассчитаны погрешности.

Анализ полученных результатов показал невозможность описания зависимости плотности водно-спиртовых растворов от температуры и крепости одним характеристическим уравнением. Сделан вывод о том, что необходимо при каждом значении крепости водно-спиртового раствора находить функциональную зависимость плотности от температуры. Исследованы линейная зависимость, кривые второго и третьего

порядка, а также экспоненциальные зависимости. Для этих зависимостей найдены коэффициенты аппроксимации и коэффициент детерминированности.

Во всех случаях зависимости достаточно хорошо описывают прогнозируемые значения, т.к. коэффициент детерминированности близок или равен 1. Лучшее совпадение с данными ГОСТ 3639–79 [1] дает уравнение третьего порядка вида:

$$\rho = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot t + \alpha_2 \cdot t^2 + \alpha_3 \cdot t^3,$$

где ρ — плотность водно-спиртового раствора, кг/м³; $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — коэффициенты уравнения регрессии; t — температура, °С.

На основании полученных результатов разработана информационная система (ИС) определения физических характеристик водно-спиртовых растворов.

Эта информационная система представляет собой самостоятельный модуль, который позволяет определять плотность водно-спиртового раствора с разрядностью до 10–5, при этом представляется возможным задавать значения крепости и температуры с десятичными и сотыми долями. В случаях, когда задаваемые значения выходят за пределы водно-спиртовых таблиц, во всплывающем окне выдается сообщение «нет данных». Программа при расчете плотности на основании температуры и крепости реализует метод линейной интерполяции. В качестве исходных данных формируется массив значений, импортированный из расширенных водно-спиртовых таблиц формата MS Excel.

Рассмотрим работу ИС на следующем примере. Допустим, что нам необходимо определить значение плотности водно-спиртового раствора при температуре $t=27,54^\circ\text{C}$ и крепости $K=10,12\%$. На первом

этапе значения температуры и крепости округляются до целых значений и в качестве промежуточных переменных сохраняются значения после запятой. Из исходного массива данных находятся значения плотности при температурах 27 и 28°C, равные при $K=10\%$ — 0,98284 и 0,98252, а также при $K=11\%$ — 0,98159 и 0,98126, соответственно. Согласно правил линейной интерполяции, для нахождения значения плотности при температуре $t=27,54^\circ\text{C}$ и $K=10\%$ необходимо воспользоваться формулой:

$$\rho = (\rho_{t=28} - \rho_{t=27}) \cdot 0,54 + \rho_{t=27} = (0,98252 - 0,98284) \cdot 0,54 + 0,98284 = 0,98267 \text{ кг/м}^3.$$

Аналогично для крепости 11%:

$$\rho = (\rho_{K=11} - \rho_{K=10}) \cdot 0,54 + \rho_{K=10} = (0,98126 - 0,98159) \cdot 0,54 + 0,98159 = 0,98141 \text{ кг/м}^3.$$

Полученные данные служат исходными для пересчета плотности при дробной крепости 10,12%:

$$\rho = (\rho_{11\%} - \rho_{10\%}) \cdot 0,12 + \rho_{10\%} = (0,98141 - 0,98267) \cdot 0,12 + 0,98267 = 0,98252 \text{ кг/м}^3.$$

Для обратного пересчета из плотности и температуры в крепость водно-спиртового раствора использован модифицированный алгоритм. Рассмотрим работу алгоритма на примере. Даны плотность водно-спиртового раствора $\rho=0,98252 \text{ кг/м}^3$ и температура $t=27,54^\circ\text{C}$ необходимо найти крепость водно-спиртового раствора. Ограничиваем температурный диапазон 27 и 28°C. При $t=27^\circ\text{C}$ находим промежуток значений плотности, в который попадает введенное значение плотности. Находим соответствующие этому промежутку значения плотности при $t=28^\circ\text{C}$.

Методом линейной интерполяции находим значение при температуре 27,540°C. Организуем два вложенных цикла — внеш-

ний с перебором значений крепости с точностью до десятых долей после запятой, и внутренний — с перебором значений крепости с точностью до сотых долей после запятой. Внутри цикла рассчитанные значения сравниваются с введенным значением плотности. При равенстве программа заканчивает работу и выводит результат в соответствующее поле интерфейса программного модуля.

На рисунке представлен интерфейс ИС с результатами расчетов по рассмотренным примерам.

В результате выполнения работы получены аппроксимационные зависимости плотности водно-спиртовых, которые позволили расширить водно-спиртовые таблицы до сотых значений температуры и крепости. На основе расширенных водно-спиртовых таблиц разработана ИС расчета плотности

Содержание водноспиртового раствора

Плотность водноспиртового раствора в зависимости от температуры и относительного содержания спирта (по объему) при температуре 20° С

Найти плотность

Содержание этанола при 20°С (по объему) 10,12

Температура, °С 27,54

Найти

Плотность, г/мл 0,98252

Найти содержание этанола

Плотность, г/мл 0,98252

Температура, °С 27,54

Найти

Содержание этанола при 20°С (по объему) 10,12

в зависимости от температуры и крепости, а также обратного пересчета значений температуры в зависимости от плотности и крепости водно-спиртовых растворов. Результаты исследования имеют не только практическое, но и теоретическое значение в изучении свойств водно-спиртовых растворов.

Список литературы

1. ГОСТ 3639–79. Растворы водно-спиртовые. Методы определения концентрации этилового спирта. Срок изменений № 1 от 01.06.1987 (рег. 11. 12.1986), № 2 от 12.09.2008.

2. Рухляева А.П. Справочник для работников лабораторий спиртовых заводов. — М.: Пищевая промышленность, 1979. — 232 с.

3. Справочник по производству спирта. Сырье, технология и теххимконтроль / Яровенко В.Л., Устинников Б.А., Богданов Ю.П. и др. — М.: Легкая и пищевая промышленность, 1981. — 335 с.

4. Стабников В.Н. Этиловый спирт. — М., 1976. — 273 с.

5. Яровенко В.Л., Маринченко В.А., Смирнов В.А. Технология спирта. — М.: Колос, 2002. — 465 с.