**УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРСТИК ПАРОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ЗАМЫКАНИЯ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ**

Дьяконов С.Г., Казанцев С.А., Клинов А.В., Дьяконов Г.С., Динмухаметова Р.А.

*ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Россия, 420015, Казань, ул. К.Маркса, 68. rezdin29@gmail.com*

Сформулирована задача о термическом уравнении состояния для определения характеристик парожидкостного равновесия в виде краевой задачи для поля давления как функции числовой плотности и температуры фазовой диаграммы. Для ее замыкания, поскольку аналитическая термодинамика незамкнута, использованы вириалы межмолекулярных сил отталкивания и притяжения и варианты возможных соотношений между ними. Рассматривается линия Холерана-Бачинского (сжимаемость равна единице) в качестве краевого условия. Разработаны методы замыкания аналитической термодинамики на основе трех подходов:

1. качественного анализа поведения системы в зависимости от вида межмолекулярного потенциала;
2. принципов подобия;
3. кинетики приближения к равновесному состоянию на моделях нелинейной динамики.

Показана возможность достижения для определения характеристик парожидкостного равновесия необходимой точности на данных компьютерного моделирования молекулярной динамики и Монте-Карло и опытных данных для бинарных смесей углеводородов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 12-08-00465-а.