

# **О построении фазовых диаграмм двухкомпонентных систем в САПР «Компас-3D» геометрическим способом**

## **On the construction of phase diagrams of two-component systems in CAD «Kompas-3D» in a geometric way**

**Белим С.С.**

Студентка РТУ МИРЭА  
e-mail: c.belim@yandex.ru

**Belim S.S.**

Student, MIREA – Russian Technological University  
e-mail: c.belim@yandex.ru

**Бойков А.А.**

старший преподаватель кафедры инженерной графики РТУ МИРЭА  
e-mail: albophx@mail.ru

**Boikov A.A.**

Senior Lecturer, Department of Engineering Graphics, MIREA – Russian Technological University  
e-mail: albophx@mail.ru

**Коровина А.В.**

Студентка РТУ МИРЭА  
e-mail: bodini1999@yandex.ru

**Korovina A.V.**

Student, MIREA – Russian Technological University  
e-mail: bodini1999@yandex.ru

### **Аннотация**

В статье предлагается использовать САПР «Компас-3D» для автоматизации построения диаграмм двухкомпонентных систем. Для этого создается параметризованная модель, которая включает в себя геометрическое место идеальных кривых, соответствующих уравнению Шредера – Ле-Шателье, в четырехмерном пространстве параметров этого уравнения, заданное на трехмерной модели в виде двух трехмерных проекций поверхностного каркаса. Модель множества идеальных кривых дополнена проекционными связями, которые позволяют получать одну или две идеальные кривые по заданным значениям энтальпии и температуры кипения компонентов смеси и совмещать их на общей плоскости диаграммы.

**Ключевые слова:** фазовые диаграммы, двухкомпонентные системы, САД-система, гипер-эпюр, четырехмерное пространство.

### **Abstract**

It is proposed to use CAD «Kompas-3D» to automate the construction of phase diagrams of two-component systems. For this, a parametrized model is created, which includes the geometric place of ideal curves corresponding to the Schroeder–Le Chatelier equation in the four-dimensional parameter space of this equation. The model of the set of ideal curves is represented by two three-dimensional projections of the surface-containing frame and is supplemented by projection bonds, which allow one or two ideal curves to be obtained from the given values of the enthalpy and temperature of boiling and to combine them on the common plane of the diagram.

**Keywords:** phase diagram, two-component system, CAD, hyper-drawing, four-dimensional space.

1. В физической химии часто для упрощения прогнозов и расчетов в отношении смесей (двух- и трехкомпонентных систем) применяют идеальные кривые [1]. Построение таких кривых может быть выполнено в различных программах, имеющих средства для вычислений и отображения графиков, но широкий набор возможностей по использованию их как непосредственных моделей открывается лишь в случае, если программа содержит инструменты для геометрических построений. Одной из таких программ является САПР «Компас-3D».

В настоящей работе предлагается геометрический способ построения плоских диаграмм двухкомпонентных идеальных систем и рассматривается его реализация в среде САПР «Компас-3D».

2. Существуют разные подходы для расчета идеальных кривых. В настоящей работе используется довольно простое, но широко применяемое на практике и в учебном процессе уравнение Шредера – Ле-Шателье [1]:

$$\ln x_i = \frac{\Delta H}{R} \cdot \left( \frac{1}{T_{\text{кип}}} + \frac{1}{T} \right) \quad (1),$$

$\Delta H$  – энтальпия парообразования,  $T_{\text{кип}}$  – температура кипения,  $T$  – температура,  $x_i$  – мольная доля вещества,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Для выбранного вещества  $\Delta H$  и  $T_{\text{кип}}$  являются постоянными. Уравнение (1) легко преобразуется к виду  $x_i = F(T)$  или, наоборот,  $T = F(x_i)$ .

3. Будем рассматривать четырехмерное пространство с ортогональными координатными осями –  $\Delta H$ ,  $T_{\text{кип}}$ ,  $T$  и  $x_i$ . Основными геометрическими формами в нем являются: гиперповерхности / гиперплоскости ( $\infty^3$ ), поверхности / плоскости ( $\infty^2$ ), кривые / прямые ( $\infty^1$ ) и точки. В таком пространстве уравнения вида –

$$\Delta H = \text{const} \quad (2.1),$$

$$T_{\text{кип}} = \text{const} \quad (2.2),$$

$$T = \text{const} \quad (2.3),$$

$$x_i = \text{const} \quad (2.4),$$

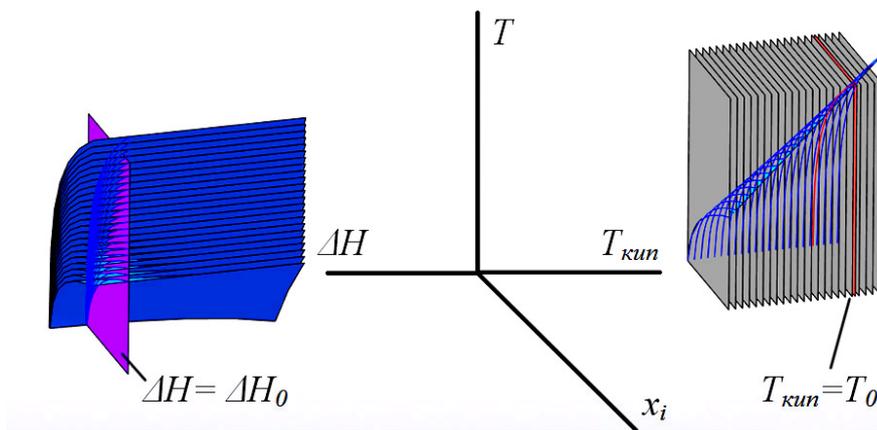
– задают соответствующие гиперплоскости (трехмерные пространства) уровня, пары уравнений – обыкновенные плоскости, тройки – обыкновенные прямые.

Уравнение (1) задает кривую гиперповерхность  $\sigma$ , которую можно рассматривать как множество всех идеальных кривых для уравнения Шредера–Ле-Шателье. Для выделения идеальных кривых гиперповерхность пересекается гиперповерхностями уровня (2.1)–(2.4), что равносильно подстановке в уравнение (1) соответствующих значений.

Этот подход может применяться к другим уравнениям с другим числом параметров.

4. В САПР «Компас-3D» имеется возможность создавать плоские и трехмерные геометрические модели, но не четырехмерные. Объекты четырехмерного пространства могут быть заданы только своими двух- или трехмерными проекциями [2]. Трехмерными проекциями гиперповерхности  $\sigma$  являются сплошные тела, что не позволяет в плоских сечениях получать кривые поверхности и линии, поэтому будем задавать трехмерные проекции гиперповерхности  $\sigma$ , как показано в [3], каркасом обыкновенных поверхностей.

Уравнениям (2.1)–(2.4) на трехмерных проекциях соответствуют обыкновенные плоскости уровня. Геометрическая схема получения идеальной кривой для заданных  $\Delta H$  и  $T_{\text{кип}}$  показана на рис. 1.



**Рис. 1.** Две трехмерные проекции гиперповерхности  $\sigma$  и геометрическая модель выделения идеальной кривой

Таким образом, для реализации предлагаемого метода необходимо:

- рассмотреть построение модели гиперповерхности при помощи каркаса в САПР «Компас-3D»;
- рассмотреть использование модели гиперповерхности для получения отдельной идеальной кривой для заданных  $T_{кин}$  и  $\Delta H$ ;
- рассмотреть построение плоской диаграммы двухкомпонентной системы.

5. Для построения каркаса выберем две трехмерные проекции  $\pi_1=(T_{кин}, T, x_i)$  и  $\pi_2=(\Delta H, T, x_i)$ . Если каждую поверхность каркаса выбрать как сечение гиперплоскостью  $T_{кин}=const$ , то ее проекцией в  $\pi_1$  будет плоскость уровня  $T_{кин}=const$ , в  $\pi_2$  – некоторая кривая поверхность, которую с заданной точностью можно построить, натянув на множество идеальных кривых, лежащих в плоскостях уровня  $\Delta H=const$ .

Таким образом, для задания  $\sigma$  достаточно:

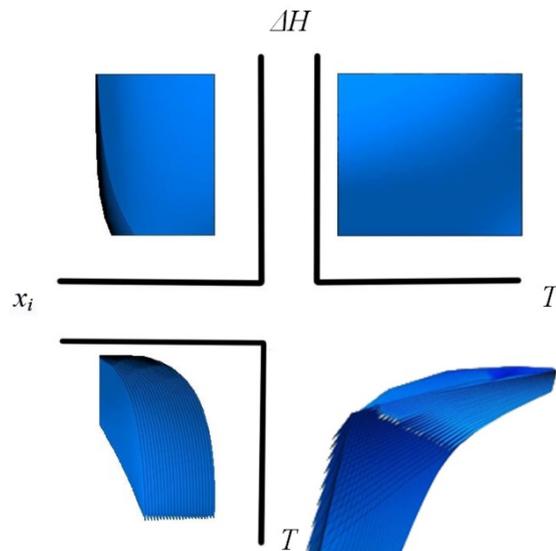
- 1) в качестве одной проекции взять набор плоскостей уровня (команда САПР «Компас-3D» – «Смещенная плоскость»);
- 2) в качестве второй проекции (назовем **телом Ласки**) взять набор поверхностей, проведенных через множества идеальных кривых.

Этот метод был реализован. Для автоматизации построения отдельных кривых использовалась программа на языке *JavaScript*, в которой для циклически изменяющихся  $T_{кин}$ ,  $\Delta H$  и  $T$  в соответствии с (1) вычислялись координаты точек. Наборы координат в текстовой форме, как показано в [4], были загружены в систему «Компас», где при помощи команды «Поверхность по сети точек» через них проводились поверхности проекции каркаса  $\sigma$  в  $\pi_2$ . На рис. 2 показаны проекции каркаса тела Ласки.

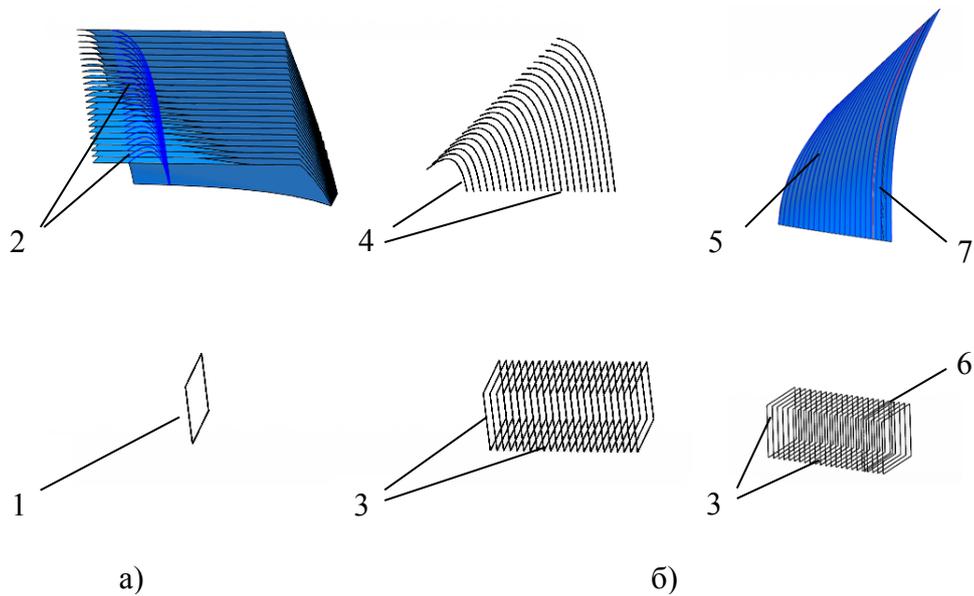
Таким образом, в среде САПР «Компас-3D» при помощи двух трехмерных проекций каркаса была задана гиперповерхность  $\sigma$  четырехмерного пространства  $(\Delta H, T_{кин}, T, x_i)$ .

6. Рассмотрим построение идеальной кривой в предлагаемом методе.

Выберем вещество и найдем в справочнике [5] значения  $\Delta H_0$  и  $T_{кин,0}$ . Значению  $\Delta H_0$  в созданной модели соответствует плоскость энтальпии  $\Delta H=\Delta H_0$  (команда «Смещенная плоскость»), которая пересекает каркас тела Ласки по множеству кривых (команды «Кривая пересечения»). Проецируем эти кривые (команда «Проекционная кривая») на соответствующие плоскости температур кипения (проекция каркаса  $\sigma$  в  $\pi_1$ ). На проекции кривых при помощи команды «Поверхность по сети кривых» натягиваем поверхность (назовем ее **плавником**). Строим плоскость температуры кипения заданного вещества  $T_{кин}=T_{кин,0}$  (команда «Смещенная плоскость»). Рассекаем плавник этой плоскостью («Кривая пересечения») и получаем искомую идеальную кривую (рис. 3).



**Рис. 2.** Проекция тела Ласки



**Рис. 3.** Построение идеальной кривой геометрическим способом:

а – построение поверхности «плавник», содержащей идеальную кривую,

б – выделение идеальной кривой,

1 – плоскость энтальпии  $\Delta H = \Delta H_0$ , 2 – кривые в пересечении с поверхностями каркаса в  $\pi_2$ ,

3 – плоскости температур кипения, составляющие проекцию каркаса в  $\pi_1$ ,

4 – проекции кривых в плоскостях температур кипения, 5 – плавник,

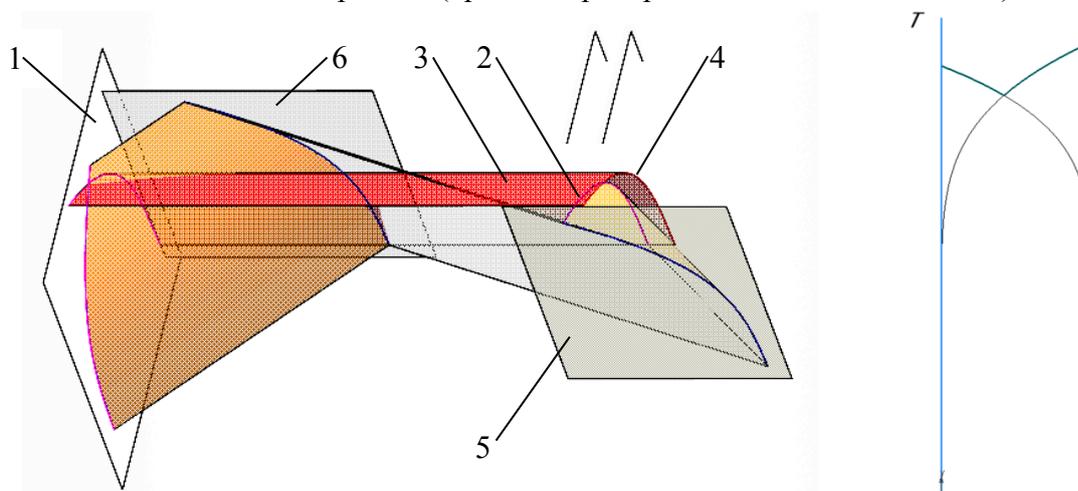
6 – плоскость  $T_{кип} = T_{кип,0}$ , 7 – идеальная кривая.

В результате рассмотренного построения получаем идеальную кривую в плоскости соответствующей температуры кипения  $T_{кип} = T_{кип,0}$ .

7. Рассмотрим соединение двух идеальных кривых для построения плоской диаграммы двухкомпонентной системы.

По двум парам значений энтальпии и температуры кипения ( $\Delta H_1$  и  $T_{кип,1}$ ,  $\Delta H_2$  и  $T_{кип,2}$ ) показанным выше способом строятся два плавника и две кривые, каждая из которых лежит в своей плоскости температуры кипения (2 и 4 на рис. 4). В качестве плоскости диаграммы удобно выбрать плоскость  $T_{кип} = 0$  (1 на рис. 4). При этом первая кривая просто проецируется (проецирующая поверхность 3) на нее при помощи команды «Проекционная кривая». При

совмещении вторая кривая должна быть зеркально отражена. Для этого используем систему вспомогательных проекций: проецируем под углом  $45^\circ$  на вспомогательную плоскость  $\mu_{2,1}$ , перпендикулярную плоскостям температур кипения (кривая поворачивается без искажения), затем на параллельную ей вспомогательную плоскость  $\mu_{2,1}$  (кривая не искажается), затем под углом  $45^\circ$  на плоскость диаграммы (кривая переворачивается без искажения).



**Рис. 4.** Геометрическая схема построения диаграммы двухкомпонентной системы и пример диаграммы для системы дифенил-1,2 дифенилэтан:

- 1 – плоскость диаграммы  $T_{кип}=0$ , 2 – первая идеальная кривая в плоскости  $T_{кип}=T_{кип,1}$ ,
- 3 – проецирующая поверхность  $\rho_1$ , переносящая первую кривую в плоскость диаграммы,
- 4 – вторая идеальная кривая в плоскости  $T_{кип}=T_{кип,2}$ , 5 – плоскость  $\mu_{2,1}$ , 6 – плоскость  $\mu_{2,2}$

8. Использование созданных моделей в учебном процессе. Описанные выше модели и алгоритмы реализованы в виде параметризованной 3D-модели в среде «Компас-3D». Для построения диаграммы двухкомпонентного раствора достаточно:

1. Открыть файл «*diagram2d.m3d*».
2. Вызвать панель управления параметрами модели – «Переменные».
3. Задать значения  $T_{кип,1}$ ,  $\Delta H_1$  и  $T_{кип,2}$ ,  $\Delta H_2$ .
4. Выполнить команду «Перестроить».
5. На плоскости  $xOy$  модели автоматически формируется диаграмма, которая может быть скопирована в графический документ (чертеж или фрагмент) или использоваться в построениях и графических расчетах.

Как показали эксперименты, для построенного с выбранной плотностью каркаса гиперповерхности погрешность определения значений температуры не превышает  $0,02\text{K}$ , значений мольной доли –  $0,02\%$  (что соответствует  $0,0002$  абсолютного значения мольной доли). Точность можно повысить, если построить модель с более плотным каркасом (с меньшим шагом по  $T_{кип}$ ,  $\Delta H$  и  $T$ , см. п. 5).

#### 9. Основные результаты.

Предложен геометрический способ построения идеальных кривых для фазовых диаграмм на основе гиперповерхности в четырехмерном пространстве параметров, соответствующей уравнению идеальной кривой.

Рассмотрена его реализация в среде САПР «Компас-3D», для чего гиперповерхность спроецирована на две трехмерные картины и представлена каркасом обыкновенных поверхностей. Рассмотрено решение двух задач при помощи этой модели: построение идеальной кривой по заданным значениям энтальпии и температуры кипения и соединение двух кривых в общей плоскости при построении диаграммы двухкомпонентной системы.

Создана параметризованная модель в формате «Компас-3D», которая может быть использована для построения отдельных кривых или совмещения их в плоскости диаграммы путем замены отдельных значений в таблице переменных модели.

Планируется использование предлагаемого способа построения идеальных кривых к созданию трехмерных моделей диаграмм трехкомпонентных систем. Планируется дальнейшее исследование предлагаемого метода для анализа экспериментальных данных.

10. Большинство работ, посвященных вопросам использования современных компьютерных технологий в учебном процессе, рассматривают возможности систем геометрического моделирования (*CAD*-систем) для создания чертежей и моделей деталей и сборочных единиц [6–8]. В действительности, возможности систем геометрического моделирования (трехмерного и плоского) значительно шире и связаны с развитием так называемого геометрического подхода как метода решения самых различных научных и инженерных задач [9, 10].

В настоящей работе было показано отличное от традиционного применение *CAD*-системы «Компас-3D» к решению задачи, не связанной с моделированием деталей и сборочных единиц, которое иллюстрирует, во-первых, что геометрический подход может с успехом применяться практически в любой области науки и практики, во-вторых, что такие, казалось бы, специфические понятия «умирающей» [11] начертательной геометрии как проекции, проецирование, двухкартинная модель и пр. естественным образом служат инструментом при решении таких задач.

### Литература

1. *Новиков Г.И.* Основы общей химии. – Москва: Высшая школа, 1988. – 431 с.
2. *Бойков А.А.* О построении моделей объектов пространства четырех и более измерений в учебном процессе // Геометрия и графика. – 2018. – Т. 6. – № 4. – С. 54–71. – DOI: 10.12737/article\_5c21f96dce5de8.36096061
3. *Бойков А.А.* К организации компьютерного контроля навыков решения термодинамических задач на основе геометрического подхода // Тринадцатая международная научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Энергия-2018»: Материалы конференции. Т. 5. – Иваново: ФГБОУ ВО «Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина», 2018. – С. 115.
4. *Бойков А.А., Шулайкин Д.А.* Визуализация геометрических фигур и отношений комплексной плоскости средствами компьютерной графики // Проблемы качества графической подготовки студентов в техническом вузе: традиции и инновации. Материалы VIII Международной научно-практической интернет-конференции, февраль – март 2019 г. – Пермь: ПНИПУ, 2019. – С. 72–93.
5. Краткий справочник физико-химических величин / Под. ред. А. А. Равделя и А. М. Пономаревой. – Санкт-Петербург: «Иван Федоров», 2003. – 240 с. – ISBN 5-8194-0071-2.
6. *Федосеева М.А.* Методика подготовки студентов технических вузов графическим дисциплинам // Геометрия и графика. – 2019. – №1. – С. 68–73. – DOI: [https://doi.org/10.12737/article\\_5c91fed8650bb7.79232969](https://doi.org/10.12737/article_5c91fed8650bb7.79232969)
7. *Поликарпов Ю.В.* Содержание вузовского курса начертательной геометрии в эпоху третьей промышленной революции // Геометрия и графика. – 2018. – №3. – С. 49–55. – DOI: [https://doi.org/10.12737/article\\_5bc453447db654.91666264](https://doi.org/10.12737/article_5bc453447db654.91666264)
8. *Филимонова О.С.* Дисциплина «Инженерная и компьютерная графика» в системе высшего военного образования // Геометрия и графика. – 2018. – №4. – С. 88–99. – DOI: [https://doi.org/10.12737/article\\_5c21fba3f26c35.85693389](https://doi.org/10.12737/article_5c21fba3f26c35.85693389)
9. *Волошинов Д.В.* О перспективах развития геометрии и ее инструментария // Геометрия и графика. – 2014. – №1. – С. 15–21. – DOI: <https://doi.org/10.12737/3844>
10. *Волошинов Д.В.* Визуально-графическое проектирование единой конструктивной модели для решения аналогов задачи Аполлония с учетом мнимых геометрических образов // Геометрия и графика. – 2018. – №2. – С. 23–46. – DOI: [https://doi.org/10.12737/article\\_5b559c70becf44.21848537](https://doi.org/10.12737/article_5b559c70becf44.21848537)
11. *Тунаков А.П.* Зачем преподавать студентам умирающие дисциплины // Поиск. – 2007. – №11 (929).