

О РАЗВИТИИ СРЕДСТВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СИСТЕМ

Белов Г.В., Аристова Н.М.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**gbelov@yandex.ru*

Расчеты параметров равновесного состояния многокомпонентных гетерогенных систем получили широкое распространение в практике исследования высокотемпературных процессов с химическими превращениями. Вероятно, первый универсальный метод расчета равновесия был представлен в 1951 году в работе сотрудников NASA «General Method and Thermodynamic Tables for Computation of Equilibrium Composition and Temperature of Chemical Reactions». В СССР также были разработан метод расчета равновесного состава и свойств продуктов сгорания ракетных топлив, создана программа для ЭВМ и база данных по термодинамическим свойствам веществ, с использованием которых в 1971 году был создан справочник «Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания». Позже в МВТУ им. Н.Э. Баумана были предложены метод и универсальный алгоритм термодинамического расчета многокомпонентных гетерогенных систем. Создана программа АСТРА, которая получила широкое распространение и была использована для решения широкого класса задач, в частности, металлургических и плазмохимических. На основе алгоритма программы АСТРА разработана программа расчета равновесного состава и свойств сложных термодинамических систем с использованием модели неидеального газа REAL. Однако в реальных процессах далеко не всегда достигается термодинамическое равновесие. Например, при расширении продуктов сгорания в сопле ракетного двигателя происходит их охлаждение, вследствие чего происходит уменьшение скоростей химических реакций, состав частично «замораживается». Для анализа этих и подобных им процессов необходимо использовать методы, сочетающие возможности термодинамики и кинетики. Такой подход нашел применение, в частности, при создании программных комплексов CHEMKIN и Chemical Workbench.