**Лекция 5. Проверка на присутствие конденсированных продуктов в химической системе**

[Проверка на присутствие конденсированных продуктов в химической системе. 2](#_Toc435457877)

## **Проверка на присутствие конденсированных продуктов в химической системе**.

В продуктах реакций химической системы могут образовываться конденсированные продукты. Примером важности учета образования конденсированных продуктах может являться термодинамическое моделирование свойств продуктов детонации конденсированных ВВ с отрицательным кислородным балансом. В таком случае, в продуктах детонации может образовываться достаточно большое количество конденсированного углерода. Отсутствие учета образования конденсированного углерода приводит к существенным ошибкам в расчете всех основных характеристик работоспособности ВВ таких как скорость детонации, метательная способность, теплота взрывчатого превращения.

Из условия фазового равновесия, химические потенциалы всех фаз, входящих в термодинамическую систему, равны:

$μ\_{j}^{с}=μ\_{}^{g}$ для *j*=1,..., *NC*

Проверка на присутствие конденсированных продуктов в химической системе основана на МЭХФ, т.е. вещество включается в состав химической системы в том случае, если это приводит к экстремизации характеристической функции.

Если задача нахождения экстремуму термодинамической функции при заданных условиях решается методом Лагранжа, учет возможного образования конденсированного вещества в продуктах термодинамической системы ведет к уменьшению функции Лагранжа соответствующей термодинамической задачи при включении в рассмотрение конденсированного продукта:



для термодинамических задач *TP*, *TV*, *SV*, *SP.*



для термодинамических задач *UV*, *HP.*

Обезразмеривая, как и раньше, множители Лагранжа с заменой знака, получаем единый критерий для всех шести термодинамических задач:

 для *i*=1, …, *NEL* и *j*=1,..., *NС*

Полная система уравнений для термодинамического расчета представляет собой систему нелинейных уравнений.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

При практическом применении численных методов для решения термодинамических задач важно учитывать последовательность счетного процесса.

**!!** Необходимо предусмотреть ограничение на число сходимостей итерационной процедуры для предотвращения «заклинивания» расчета в тех редких случаях, когда конденсированные вещества то включаются в состав системы, то исключаются из него. Это возможно, если в заданных условиях возможно сосуществование фаз одного и того же вещества, например, вблизи линии плавления, или при если в продуктах возможно образование большого количества различных конденсированных веществ.

В таких случаях, заданное число сходимостей может не удовлетворять условиям проверки на присутствие конденсированных веществ в химической системе. Однако бездумное увеличение количества итераций не приведет в сходимости расчетного процесса.

 Наиболее целесообразным будет аналитическая оценка, проведенная исследователем, основанная на анализе фазовых диаграмм возможных конденсированных веществ, их свойств с тем, чтобы принудительно «исключить» из рассмотрения продукта, присутствие которых заведомо маловероятно в заданных условиях. Например, при расчетах при повышенных температурах нецелесообразно «включать» в расчет лед.

Если в исходных данных задачи для конденсированного вещества задано его неизменное количество в химической системе, т.е. если это вещество считается «замороженным», то никаких проверок на присутствие данного вещества в химической системе не производится.

В результате термодинамического моделирования получается численное решение, описывающее все теплофизические и термодинамические свойства всех продуктов заданного физико-химического процесса, а не только термодинамической системы в целом.

* АНАЛИЗ ПРЕДЫДУЩИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
* ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ ПРИ ОТСУТСВИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ
* В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ
* ПРОГНОЗ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ИЗУЧАЕМЫХ ВЕЩЕСТВ
* ЭКОНОМИЯ (УМЕНЬШЕНИЕ НАТУРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ)
* ПЛАНИРОВАНИЕ ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**–** АДЕКВАТНОСТЬ МОДЕЛИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОМУ ПРОЦЕССУ

**–** ПОГРЕШНОСТЬ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА