

Оглавление

Предисловие	3
Введение	5
Глава 1. Формулировка задачи расчета параметров равновесного состояния реальных термодинамических систем.....	11
1.1. Равновесное состояние термодинамической системы	11
1.2. Использование принципа возрастания энтропии для определения равновесного состава термодинамической системы	13
1.3. Химический потенциал	19
1.4. Расчет равновесного состава с использованием идеальных моделей.	21
1.5. Расчет равновесного состава с использованием неидеальных моделей	24
Глава 2. Моделирование равновесных состояний термодинамических систем при заданных значениях температуры и давления.	28
2.1. Алгоритм расчета равновесного состава термодинамических систем при заданных значениях температуры и давления	28
2.2. Критерии достижения заданной точности.....	33
2.3. Расчет давлений насыщенных паров	34
2.4. Расчет равновесного состава термодинамических систем с использованием моделей неидеального раствора.....	38
Глава 3. Модели реального газа	41
3.1. Расчетные соотношения для вычисления термодинамических функций системы.....	41
3.2. Уравнения состояния реального газа	48
3.3. Модели смешения	58
3.4. Сравнение результатов термодинамических расчетов в однофлюидном и трехфлюидном приближениях	62
Глава 4. Алгоритм расчета равновесного состава термодинамических систем при повышенных давлениях	64
4.1. Система уравнений и неравенств для расчета равновесного состава.....	64
4.2. Решение системы уравнений	67
4.3. Влияние учета реальных свойств газовой фазы на равновесный состав и термодинамические характеристики моделируемых систем	71
4.4. Расчет производных состава и скорости звука в многокомпонентных гетерогенных термодинамических системах с учетом реальных свойств газовой фазы	74
4.5. Расчет транспортных свойств продуктов сгорания при повышенном давлении.....	82

Глава 5. Термодинамический анализ систем при повышенных значениях температуры и давления	84
5.1. Программа расчета равновесного состава и параметров термодинамических систем при повышенных давлениях	84
5.2. Расчет баллистических характеристик порохов	87
5.3. Влияние погрешностей параметров потенциала Леннард-Джонса на результаты термодинамических вычислений	93
5.4. Определение параметров детонации конденсированных ВВ	95
5.5. Результаты расчетов термодинамических и теплофизических характеристик воздуха с использованием программы REAL	97
5.6. Другие области применения метода	101
Глава 6. Информационное обеспечение термодинамических расчетов	105
6.1. Влияние погрешностей термодинамических данных на результаты расчетов равновесного состава и свойств исследуемых систем	105
6.2. Вероятностный подход к проблеме термодинамического моделирования высокотемпературных процессов	113
6.3. Аппроксимация термодинамических функций газообразных веществ.....	118
6.4. Прогнозирование термодинамических свойств индивидуальных веществ.....	124
Глава 7. Программные комплексы для термодинамического моделирования и информационно-справочные системы о физико-химических свойствах веществ.....	128
7.1. Концепция программного комплекса для термодинамического моделирования равновесных состояний высокотемпературных систем	128
7.2. Программный комплекс ИВТАНТЕРМО для Windows	130
7.3. Визуализация результатов термодинамического моделирования.....	137
7.4. Использование СУБД для хранения и поиска информации о физико-химических свойствах веществ	141
7.5. Информационно-справочная система «Термические константы веществ»	148
7.6. Объектно-ориентированная библиотека для создания средств термодинамического моделирования и информационных систем о термодинамических свойствах веществ	150
7.7. Термодинамика в Интернете	152
Заключение	162
Список литературы	164