

РАВНОВЕСНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НЕРАВНОВЕСНЫХ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

М. С. Зароднюк, Б. М. Каганович, А. В. Кейко

Излагается сформулированная на языке математического программирования модель экстремальных промежуточных состояний (МЭПС) [1], которая позволяет определять на основе положений классической равновесной термодинамики предельные показатели разнообразных физико-химических процессов.

От традиционных моделей равновесной термодинамики МЭПС отличается двумя основными особенностями. Во-первых, она дает возможность находить не только точку конечного равновесия, но и просматривать всю область термодинамической достижимости из заданного исходного состояния системы и находить в ней равновесное состояние (промежуточное или частичное), соответствующее экстремальному значению интересующего исследователя свойства (например максимальные концентрации полезных продуктов химической реакции). Во-вторых, в применяемую математическую модель включаются записанные в термодинамической форме (без использования переменной времени) ограничения на лимитирующие осуществление равновесий необратимые процессы переноса [2].

Приводится обоснование возможности "равновесного" описания различных неравновесностей и необратимостей. Исследуются особенности областей термодинамической достижимости для разных типов МЭПС с использованием выпуклого анализа и теории графов.

Эффективность предлагаемых подходов иллюстрируется на примерах анализа характеристик процессов сжигания газа в камере сгорания газовой турбины, газификации низкосортных твердых топлив и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ. Проект 05-02-16626.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gorban A.N., Kaganovich B.M., Filippov S.P., Keiko A.V., Shamansky V.A., Shirkalin I.A. Thermodynamic Equilibria and Extrema. Analysis of Attainability Regions and Partial Equilibria. - Springer. 2006 - 305p.
2. Gorban A.N., Karlin I.V. Constructive Methods of Invariant Manifolds for Physical and Chemical Kinetics. - Springer. 2005. - 478 p.

Зароднюк Максим Сергеевич, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева СО РАН, Лермонтова, 130, Иркутск, 664033, Россия, тел. (8-3952) 42-34-43, факс. (8-3952) 42-67-96, max@isem.sei.irk.ru.

Каганович Борис Моисеевич, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева СО РАН, Лермонтова, 130, Иркутск, 664033, Россия, тел. (8-3952) 42-74-96, факс (8-3952) 42-67-96, thermo@isem.sei.irk.ru.

Кейко Александр Владимирович, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева СО РАН, Лермонтова, 130, Иркутск, 664033, Россия тел. (8-3952) 42-34-64, факс (8-3952) 42-67-96, keiko@isem.sei.irk.ru.