

## О НЕОБХОДИМОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ В РАСЧЕТАХ С КОНЕЧНЫМИ СКОРОСТЯМИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

В. В. Власенко<sup>1</sup>, А. Ю. Ноздрачев<sup>2</sup>

**Аннотация:** Рассмотрена проблема получения в расчетах нефизичного стационарного состояния — «динамического» равновесия, которое характеризуется протеканием кольцевых цепочек реакций с конечными скоростями. Показано, что коррекция кинетической схемы для устранения «динамического» равновесия может приводить к очень сильному изменению неравновесного развития процесса и теплового эффекта реакции. Показано, что распространенная в настоящее время практика вычисления констант скоростей обратных реакций через константы скоростей прямых реакций и термодинамические потенциалы устраняет и возможность получения нефизичного «динамического» равновесия, и возможность нефизичного развития неравновесного процесса в численном расчете.

**Ключевые слова:** константа равновесия; термодинамический потенциал; тепловой эффект реакции; кинетическая схема

### Литература

1. *Ширяева А. А.* О стационарном состоянии в потоке реагирующей смеси газов // Хим. физика, 2010. Т. 9. № 1. С. 21–30.
2. *Баев В. К., Головичев В. И., Димитров В. И., Ясков В. А.* Расчет воспламенения и горения струи водорода в воздухе с конечными скоростями химических реакций // Физика горения и взрыва, 1974. № 1. С. 65–74.
3. Физическая химия. Т. 2: Электрохимия. Химическая кинетика и катализ / Под ред. К. С. Краснова. — М.: Высшая школа, 1995. 319 с.
4. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. 1: Методы расчета / Под ред. В. П. Глушко. — М.: АН СССР, 1971. 263 с.
5. *Власенко В. В.* О различных способах определения теплового эффекта и полноты сгорания в потоке реагирующего газа // Ученые записки ЦАГИ, 2014. Т. XLV. № 1. С. 35–59.
6. *Davidenko D., Gökalp I., Dufour E., Magre P.* Numerical simulation of hydrogen supersonic combustion and validation of computational approach. AIAA Paper No. 2003-7033, 2003. 11 p.
7. *Davidenko D., Gökalp I., Dufour E., Magre P.* Systematic numerical study of the supersonic combustion in an experimental combustion chamber. AIAA Paper No. 2006-7913, 2006. 25 p.
8. *Старик А. М., Титова Н. С., Шарипов А. С., Козлов В. Е.* О механизме окисления синтез-газа // Физика горения и взрыва, 2010. Т. 46. № 5. С. 3–19.
9. *Medvedev S. P., Agafonov G. L., Khomik S. V., Gelfand B. E.* Ignition delay in hydrogen–air and syngas–air mixtures: Experimental data interpretation via flame propagation // Combust. Flame, 2010. Vol. 157. No. 7. P. 1436–1438.
10. *Weydahl T., Pooyapakkam M., Seljeskog M., Haugen N. E. L.* Assessment of existing H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> chemical reaction mechanisms at reheat gas turbine conditions // Int. J. Hydrogen Energ., 2011. Vol. 36. No. 18. P. 12025–12034.
11. *Schönborn A., Sayad P., Konnov A. A., Klingmann J.* OH\*\*-chemiluminescence during autoignition of hydrogen with air in a pressurised turbulent flow reactor // Int. J. Hydrogen Energ., 2014. Vol. 39. No. 23. P. 12166–12181.
12. *Tereza A. M., Smirnov V. N., Vlasov P. A., Lyubimov A. V., Sokolova I. L., Shumova V. V., Ziborov V. S.* Numerical simulation of the autoignition of hydrogen–air mixtures behind shock waves // J. Phys. Conf. Ser., 2015. Vol. 653. No. 1. P. 012059.
13. *Власов П. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М.* Реакции инициирования самовоспламенения смесей H<sub>2</sub>–O<sub>2</sub> в ударных волнах // Хим. физика, 2016. Т. 35. № 6. С. 35–48.
14. *Пурмаль А. П.* А, Б, В... химической кинетики. — М.: ИКЦ Академкнига, 2004. 277 с.

Поступила в редакцию 14.02.17

<sup>1</sup>Центральный аэрогидродинамический институт (ЦАГИ), vlasenko.vv@yandex.ru

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (МФТИ), buchal3@inbox.ru