

Научная статья
УДК 533.27
DOI: [10.34759/trd-2022-123-10](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-10)

ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ РЕАЛЬНОГО ГАЗА НА РАСПАД ПРОИЗВОЛЬНОГО РАЗРЫВА В ДЕТОНИРУЮЩЕМ ГАЗЕ

Владимир Юрьевич Гидаспов^{1✉}, Зыонг Минь Дык²

^{1,2}Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

¹gidaspov@mai.ru✉

²dmd.lqd@gmail.com

Аннотация. Рассматривается задача о распаде произвольного разрыва на границе раздела между многокомпонентными газами, свойства которых описываются вириальным термическим уравнением состояния с однофлюидной моделью смешения. Представлены физико-математическая модель, вычислительные алгоритмы и результаты численного моделирования. Вычислительная модель реализована для трех случаев: первый – “замороженный”, физико-химические процессы в газах не происходят и концентрации компонентов не меняются; второй – “равновесный” концентрации химических компонентов удовлетворяют условиям химического равновесия; третий – комбинированный, концентрации компонентов слева и справа от разрыва могут быть “замороженными” или “равновесными”. Проведены расчетно-теоретические исследования распада разрыва на границе: аргон – метано-воздушная горючая смесь и гелий – водородо-воздушная горючая смесь.

Определены диапазоны начальных данных, при которых результаты расчетов с использованием термического уравнения состояния реального и совершенного газов существенно отличаются.

Ключевые слова: реальный газ, равновесная адиабата, детонация, термодинамическое моделирование, распад произвольного разрыва в равновесно-реагирующем и детонирующем газе

Для цитирования: Гидаспов В.Ю., Зыонг М.Д. Влияние свойств реального газа на распад произвольного разрыва в детонирующем газе // Труды МАИ. 2022. № 123.

DOI: [10.34759/trd-2022-123-10](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-10)

THE EFFECT OF THE PROPERTIES OF A REAL GAS ON SOLUTION OF RIEMANN PROBLEM IN DETONATING GAS

Vladimir Yu. Gidasпов^{1✉}, Duong Minh Duc²

^{1,2}Moscow Aviation Institute (National Research University),

Moscow, Russia

¹gidasпов@mai.ru✉

²dmd.lqd@gmail.com

Abstract. The article considers a self-similar Riemann problem on the border between multicomponent gases which properties are being described by a virial thermal equation of state with a single-fluid mixing model. A physical-and-mathematical model, computational

algorithms and numerical simulation results are presented. The computational model is implemented for the three cases, namely, the first one is “frozen”, i.e. physico-chemical processes in gases do not originate, and the components concentrations do not change. The second one is “equilibrium”, which means that concentrations of chemical components satisfy the chemical equilibrium conditions. The third is a combined one, i.e. the of components concentrations to the left and right of the gap can be either “frozen” or “equilibrium”. The solution of Riemann problem always includes a discontinuity separating the initial gas mixtures and, depending on the initial parameters, a fan of rarefaction waves or a shock wave propagating to the left and right of the discontinuity. In the case of an explosive mixture, a recompressed detonation wave or a Chapman-Jouget detonation wave with a fan of rarefaction waves docked to it can propagate through it, while it is assumed that the composition of the combustion products is equilibrium.

A computational algorithm has been developed for solving the corresponding system of differential-algebraic equations expressing the laws of conservation of mass, momentum and energy for the cases of continuous flows (fan of rarefaction waves) and discontinuous flows (shock and detonation waves), supplemented by thermal and caloric equations of state and, if necessary, thermodynamic equilibrium conditions.

Computational and theoretical studies of the decay of the gap at the boundary: argon - methane-air combustible mixture and helium - hydrogen-air combustible mixture have been performed. The initial data ranges at which the results of calculations using the thermal equation of state of real and perfect gases differ significantly are determined.

Keywords: real gas, equilibrium adiabatic, detonation, thermodynamic modeling, decay of an arbitrary gap in an equilibrium-reacting and detonating gas

For citation: Gidasov V.Yu., Duong M.D. The effect of the properties of a real gas on solution of riemann problem in detonating gas. *Trudy MAI*, 2022, no. 123. DOI: [10.34759/trd-2022-123-10](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-10)

Введение

Классическая модель детонационного горения предлагает, что за скачком уплотнения горючая смесь сгорает мгновенно, образуя детонационную волну (ДВ), в которой происходит процесс преобразования химической энергии в тепловую [1,2]. Задача о распаде разрыва на границе инертного и горючего газов была впервые сформулирована и решена Бам-Зеликовичем Г.С. [3]. Задача о распаде произвольного разрыва является одним из основных элементов численных методов решения уравнений газовой динамики, базирующихся на методе С.К. Годунова [4,5]. Использование точного решения задачи о распаде разрыва в многомерных алгоритмах не представляется возможным, поэтому в последнее время появилось большое количество приближенных решателей, охватывающих различные среды с различными уравнениями состояния [4]. В работах [6,7] приводится обобщение вычислительного алгоритма точного решения задачи о распаде произвольного разрыва на случай равновесно реагирующей смеси совершенных газов.

Моделирование процессов детонации и изучение структуры детонационной волны помимо знания кинетики химических реакций, также требует знания уравнения состояния продуктов детонации [7-16]. В настоящей работе рассматривается применение уравнения состояния реального газа с вириальными коэффициентами для определения характеристик при распаде разрыва на границе между инертным и детонирующим газом.

Физико-математическая модель

Рассмотрим задачу о распаде произвольного разрыва на границе между инертным газом и детонирующей смесью [3, 4, 12]. Рассматривается бесконечный канал постоянного сечения, разделенный мембраной. Слева от мембраны находится инертный газ, справа – горючая смесь (рис. 1). Считается, что в начальный момент времени мембрана мгновенно удаляется и по горючей смеси начинает распространяться детонационная волна.

Возникающее течение является автомодельным. Скорости всех волн постоянны, а газодинамические параметры зависят только от отношения $\xi = x/t$. Для детонирующих горючих смесей детонационная волна может распространяться либо в режиме Чепмена-Жуге (ДВ ЧЖ), либо в пересжатом режиме. Скорость волны детонации в режиме Чепмена-Жуге относительно продуктов детонации звуковая, а пересжатой — дозвуковая [2,5]. Из тех же соображений, что и при классификации возможных конфигураций в классической задаче [4] о распаде разрыва в

нереагирующем газе, получаем, что по инертному газу может распространяться либо ударная волна, либо веер волн разрежения, а по детонирующему газу — либо детонационная волна в режиме Чепмена-Жуге с присоединённой к ней волной разрежения (ВР), либо пересжатая волна детонации как разрыв, разделяющий области течения с постоянными значениями газодинамических параметров, между двумя волнами образуется контактный разрыв (КР), отделяющий инертный газ от продуктов сгорания.

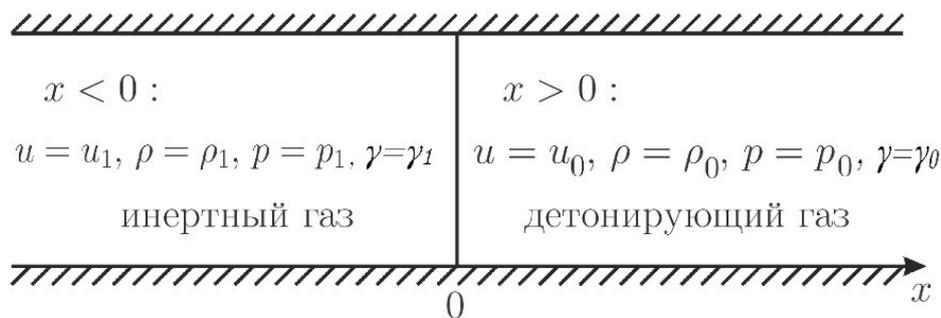


Рис. 1 – Схема, иллюстрирующая постановку задачи о распаде разрыва с детонационной волной; u – скорость, p – давление, ρ – плотность, γ – химический состав

На рис. 2 на плоскости x, t показаны все возможные конфигурации волн, возникающих при распаде разрыва с детонационной волной [3,4].

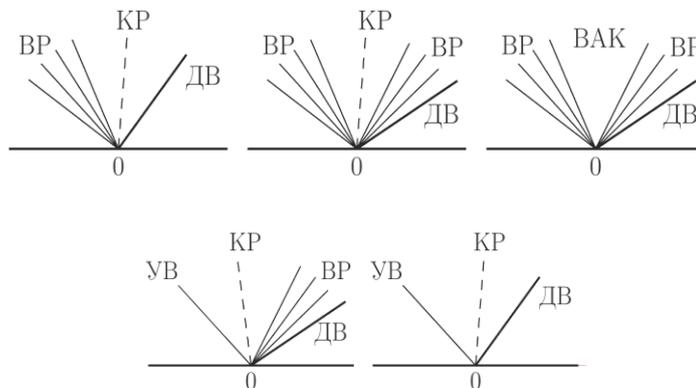


Рис. 2. Возможные конфигурации волн. ДВ, УВ — детонационная и ударная волна, ВР — волна разрежения, КР — контактный разрыв, ВАК — вакуум (давление на КР равна нулю).

Для того чтобы найти связь между параметрами среды до и после фронта ударной или детонационной волны, воспользуемся законами сохранения массы, импульса и энергии:

$$\begin{aligned} \rho(D-u_D) &= \rho(D-u_3) \\ p_D + \rho(D-u_D)^2 &= p_3 + \rho_3(D-u_3)^2 \\ \rho_D(D-u_D) \left(U_D + \frac{p_D}{\rho_D} + \frac{(D-u_D)^2}{2} \right) &= \rho_3(D-u_3) \left(U_3 + \frac{p_3}{\rho_3} + \frac{(D-u_3)^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

где u, D, ρ, p, U, T соответственно скорость газа, скорость фронта детонации, плотность, давление, внутренняя энергия и температура. Индекс «Д» обозначает параметры течения до ударной волны, «З» - за ударной волной.

Из системы (1) можно получить уравнение для ударной адиабаты (УА):

$$H - H_m - \frac{1}{2}(p - p_m) \left(\frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho_m} \right) = 0, \quad m = 1, 2 \quad (2)$$

и соотношения, связывающие перепады скорости, давления и плотности на ударной волне:

$$u - u_1 + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho} \right) (p - p_1)} = 0 \quad - \text{ для левой ударной волны,} \quad (3)$$

$$u - u_2 - \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho}\right)(p - p_2)} = 0 \text{ - для правой ударной волны.}$$

Система уравнений одномерных нестационарных движений с плоскими волнами, зависит от переменной $\xi = x/t$ и может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} (u - \xi) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} &= 0 \\ (u - \xi) \frac{du}{d\xi} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} &= 0 \\ (u - \xi) \frac{dS}{d\xi} &= 0 \end{aligned} \tag{4}$$

Система (4) имеет два решения. Первое описывает однородное состояние газа $u = const, \rho = const, p = const$. Второе представляет собой решение для центрированных волн Римана:

$$\begin{cases} \xi = \frac{dx}{dT} = u \pm a, du \pm \frac{1}{\rho a} dp = 0 \\ S = const \end{cases} \tag{5}$$

где S – энтропия.

Из системы (5) получим соотношения, связывающие параметры до и после веера вол разрежения:

$$u - u_1 + \int_{p_1}^p \frac{dp}{\rho a} = 0 \text{ - для левого веера,}$$

$$u - u_2 - \int_{p_1}^p \frac{dp}{\rho a} = 0 \text{ - для правого веера} \quad (6)$$

$S = S_m, m = 1, 2$ - условие сохранения энтропии.

Как отмечалось в [8-16] выбор уравнения состояния имеет определяющее значение для точного расчета параметров детонации Чепмена-Жуге равновесного состава и свойств продуктов детонационного превращения. Уравнение идеального газа не может быть использовано для описания параметров состояния при высоких давлениях. Описать поведение реальных газов при таких условиях невозможно без учета межмолекулярного взаимодействия и собственного объема молекул.

Для решения инженерных задач используются в основном эмпирические, полуэмпирические и теоретические уравнения состояния реального газа. В рамках этого исследования были использованы упрощенное вириальное уравнение и однофлюидная модель смешения [17-19]:

$$\frac{pv}{R_0 T \gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{C\gamma^2}{v^2} \text{ или } pv = zR_0 T \gamma, \quad (7)$$

где B, C – вириальные коэффициенты; z – параметр сжимаемости; $\gamma = \sum \gamma_i$ – суммарное количество молей. Вириальные коэффициенты для чистого газа зависят только от его температуры и могут быть определены теоретически обоснованным методом. Конкретные выражения для вириальных коэффициентов были приведены в работе [17].

Для смесей газов находящихся, слева и справа от исходного разрыва соблюдаются условия сохранения химических элементов:

$$\sum_{i=1}^N A_{K}^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \quad (8)$$

где A_k^i - матрица состава, количество атомов k -ого элемента в i -ом веществе; γ_k^0 - заданная мольно-массовая концентрация k -ого элемента – определяемая по исходному составу. В силу того, что в физико-математической модели учитывается возможность появления ионизованных веществ в продуктах детонации, также должно соблюдать условие электронейтральности:

$$\sum_{i=1}^N A_e^i \gamma_i = 0, \quad (9)$$

где A_e^i - электрический заряд i -го вещества.

При переходе через детонационную волну химический состав смеси меняется. До ДВ горючая смесь остается в исходном состоянии, за ДВ находятся продукты сгорания, концентрации которых удовлетворяют соотношениям (8)-(9) и условиям термодинамического равновесия. В состоянии термодинамического равновесия концентрации химических компонент являются неявно заданными функциями двух термодинамических параметров, например, давления и температуры, и химического (элементного) состава слева и справа от исходного разрыва соответственно. Особенности численного моделирования равновесного состояния при использовании уравнения состояния реального газа были рассмотрены в работе [15-18]. Из второго

закона термодинамики следует, что в состоянии равновесия энтропия изолированной системы достигает максимума [19, 20]:

$$S(U, v, \vec{\gamma}) \rightarrow \max_{\vec{\gamma}}$$

при соблюдении условий постоянства объема $dv = 0$ и внутренней энергии $dU = 0$.

При помощи метода неопределенных множителей Лагранжа задачу отыскания координат условного экстремума можно свести к решению системы нелинейных уравнений и неравенств. Функция Лагранжа имеет следующий вид:

$$\Lambda = S + \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_k \left(\sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i - \gamma_k^0 \right) + \lambda_e A_e^i \gamma_i, \quad \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N$$

где λ_k - неопределенные множители функции Лагранжа.

Отсюда имеются [17, 18]:

$$\ln \gamma_i = \ln \left(\frac{p_0 V}{R_0 T} \right) + \frac{TS_i^0 - H_i^0}{R_0 T} + \frac{\sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \lambda_k}{R_0} + \frac{A_e^i \lambda_e}{R_0} + \frac{\Delta \mu_i}{R_0 T}, \quad i = 1 \dots N \quad (10)$$

где λ_j, λ_e - множители Лагранжа, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298,15$ К; $R_0 = 8,3144$ Дж/моль.К – универсальная газовая постоянная, $\Delta \mu_i$ - слагаемое, учитывающее влияние свойства реальных газов на химический потенциал, являющее функцией состояния $\Delta \mu_i = \Delta \mu_i(p, T, \gamma)$. Соотношения (3)-(6) можно рассмотреть как функции давления, поскольку составляющие могут выразиться через давление $T = T(p), \rho = \rho(T), a = a(p)$. Следовательно, решение задачи о распаде произвольного разрыва сводится к

решению одного нелинейного уравнения относительно давления на контактном разрыве. Если вводим функции $f(p, p_m)$:

$$f(p, p_m) = \begin{cases} \int_{p_1}^p \frac{dp}{\rho a}, & p < p_m - \text{ для ВР} \\ \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho}\right)(p - p_m)}, & p > p_m - \text{ для УР} \end{cases} \quad (11)$$

то решение задачи о распаде произвольного разрыва сводится к решению одного нелинейного уравнения относительно давления:

$$F(p) = u_2 - u_1 + f(p, p_1) + f(p, p_2) = 0. \quad (12)$$

Решить задачу о распаде разрыва - это значит определить реализуемую при конкретных параметрах конфигурацию, найти параметры течения слева и справа от контактного разрыва (на контактном разрыве, как известно, скорость и давление газа непрерывны, а плотность, температура и концентрации могут претерпевать разрыв) и при необходимости рассчитать параметры внутри всера волн разрежения.

Решение рассматриваемой задачи можно разбить на несколько этапов. На первом этапе находятся параметры детонации Чепмена-Жуге, распространяющейся по исходной горючей смеси. Для этого решаются соотношения (1), дополненные уравнениями состояния и для газа за- водной – условиями термодинамического равновесия, а также условием Чепмена-Жуге: $D - u = a$ (a – равновесная скорость звука). Используемая методика расчета состояния Чепмена-Жуге для случая уравнения состояния реального газа приведена в работе [17]. На втором этапе решается вспомогательная задача о распаде разрыва (рис. 3) с параметрами, равными

u_1, p_1, ρ_1 при $x < 0$, и найденными на первом этапе параметрами детонации Чепмена-Жуге $u_{чж}, p_{чж}, \rho_{чж}$ при $x > 0$.

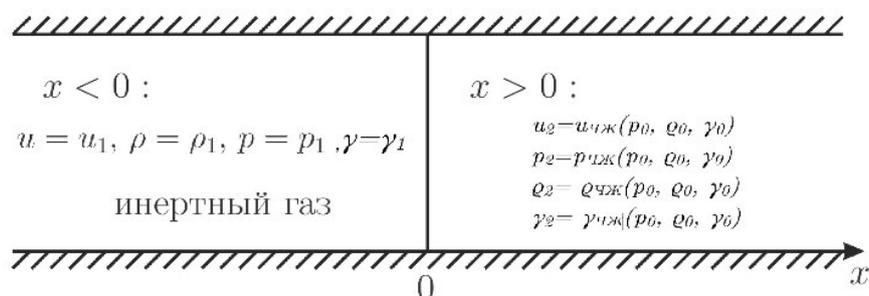


Рис. 3 –Схема вспомогательной задачи

Если в полученном решении, направо распространяется веер волн разрежения, то в исходной задаче реализуется конфигурация с детонационной волной Чепмена-Жуге и полученное решение является решением исходной задачи. Если при решении вспомогательной задачи образовалась ударная волна, движущаяся направо, то в исходной задаче реализуется ситуация с волной детонации в пересжатом режиме. В этом случае реализуется третий этап, на котором задача о распаде разрыва решается в соответствии с начальными условиями, приведенными на рис. 1. Необходимо отметить, что выполнение третьего этапа без предварительной реализации первого и второго может приводить к отсутствию решения.

Рассмотрим особенности при решении уравнения (12) с использованием (7) для газа высокого давления. Для его решения целесообразно применять метод Ньютона с параметром релаксации. На каждом шаге итерации новое приближение находится по формуле:

$$p^{n+1} = p^n - \alpha \frac{F(p^n)}{F'_p(p^n)}, \quad (13)$$

где $0 < \alpha < 1$ – параметр релаксации. Для рассмотренных смесей в рамках этой статьи при программной реализации принятие $\alpha = 0,4$ позволяет получить хорошую сходимость при определении давления на контактном разрыве.

Производную $f(p, p_m)$ можно посчитать:

$$\frac{df(p, p_m)}{dp} = \begin{cases} \frac{1}{\rho a}, & p < p_m \\ \frac{\left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho} \right) - \frac{p - p_m}{\rho^2} \left(\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T + \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \frac{dT}{dp} \right)}{2 \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho} \right) (p - p_m)}}, & p > p_m \end{cases} \quad (14)$$

При этом: $\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T = - \frac{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p}{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho}$, $\frac{dT}{dp}$ может быть определено из адиабаты Гюгонио (2):

$$\frac{dT}{dp} = \frac{- \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho_m} \right) - \frac{p - p_m}{2 \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T}{\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p + \frac{p - p_m}{2 \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p}, \quad \text{где} \quad \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T = - \frac{\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p - \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_\rho - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho}{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho}.$$

Окончательная формула для расчета производной $\frac{dT}{dp}$ вне зависимости от

уравнения состояния газа имеет вид:

$$\frac{dT}{dp} = \frac{(C_p - C_v) \left(\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right)^{-1} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho} \right) - \frac{p - p_m}{2 \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T}{C_p + \frac{p - p_m}{2 \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p} \quad (15)$$

Значения $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$, $C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_\rho$, $\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p = -\frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p$, $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho$ для реального газа

могут быть найдены совместно с решением задачи расчета равновесного состава [8, 17,18]

На каждом шаге итерации при известном давлении параметры газа (плотность, температура, химический состав) в волне разрежения находятся из условия изэнтропичности (6).

Система уравнений имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \ln \gamma_i = \ln \left(\frac{p_0 v}{R_0 T} \right) + \frac{TS_i^0 - H_i^0}{R_0 T} + \frac{\sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \lambda_j}{R_0} + \frac{A_e^i \lambda_e}{R_0} + \frac{\Delta \mu_i}{R_0 T}, i = 1 \dots N \\ \sum_{i=1}^{N_e} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^o, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \\ pv - zRT\gamma = 0 \\ S_m - \sum_i \gamma_i \left(S_i^0 - R \ln \frac{R_0 T \gamma_i}{p_0 v} \right) - \Delta S = 0 \\ p = p^n \end{array} \right. \quad (16)$$

где ΔS - слагаемое, учитывающее влияние свойства реальных газов на энтропию, p^n

- значение давления на n -ом итерационном шаге.

Со стороны ударной волны необходимо решить систему:

$$\left\{ \begin{array}{l} \ln \gamma_i = \ln \left(\frac{p_0 v}{R_0 T} \right) + \frac{TS_i^0 - H_i^0}{R_0 T} + \frac{\sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \lambda_j}{R_0} + \frac{A_e^i \lambda_e}{R_0} + \frac{\Delta \mu_i}{R_0 T}, i = 1 \dots N \\ \sum_{i=1}^{N_e} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \\ pv - zR_0 T \gamma = 0 \\ H - H_m - \frac{1}{2}(p - p_m)(v + v_0) = 0 \\ p = p^n \end{array} \right. \quad (17)$$

Скорость газа на контактном разрыве вычисляется по формуле:

$$u = \frac{1}{2}(u_1 + u_2 - f(p, p_1) + f(p, p_2)) \quad (18)$$

Исследование влияния начального давления на решение задачи о распаде произвольного разрыва на границе между инертным и детонирующим газами

Рассмотрим решение задачи о распаде разрыве для детонирующего газа в покое газе. Пусть левое полупространство заполнено аргоном с температурой $T_l=300\text{К}$ и давлением p_l до 100МПа, правое – стехиометрической метано-воздушной смесью, температура - $T_0 = 300\text{К}$, давление варьируется от p_0 до 5МПа. Предполагаем, что состав левого полупространства остается неизменным $\gamma_i = const$.

Рассматриваемые начальные данные приведены в таблице 1.

Табл. 1

| | T | U , кДж/кг | I , кДж/кг | p , МПа | v , м ³ /кг | ρ , кг/м ³ | S , Дж/кг.К |
|--|-----|--------------|--------------|-----------|--------------------------|----------------------------|---------------|
| Слева от разрыва <i>Ar</i> | 300 | 0,59 | 0,97 | 5,00 | 0,0125 | 80,08 | 3062,42 |
| | | | | 10,00 | 0,0062 | 160,15 | 2918,15 |
| | | | | 20,00 | 0,0031 | 320,31 | 2773,88 |
| | | | | 50,00 | 0,0012 | 800,77 | 2583,17 |
| | | | | 70,00 | 0,0009 | 1121,08 | 2513,14 |
| | | | | 100,00 | 0,0006 | 1601,55 | 2438,91 |
| Справа от разрыва Метан - воздух | 300 | -258,34 | -257,78 | 0,10 | 0,90 | 1,11 | 7222,54 |
| | | | | 0,50 | 0,18 | 5,56 | 6740,12 |
| | | | | 1,00 | 0,09 | 11,12 | 6532,35 |
| | | | | 2,00 | 0,04 | 22,24 | 6324,58 |
| | | | | 5,00 | 0,02 | 55,60 | 6049,92 |

Как показано в [17] при увеличенном начальном давлении целесообразно рассмотреть отличие равновесного термодинамического состояния с применением модели реального газа от совершенного. При численном моделировании считается, что в состав продуктов сгорания входит 74 веществ: O_2 , N_2 , Ar , CO_2 , C , CH_2 , CH_3 , CH_2OH , CHO^+ , HCO , CN , CNN , CO , $COOH$, H^- , H , H_2 , H_2CO , $HCOOH$, H_2O^+ , H_2O , H_2O_2 , H_3O^+ , HCN , HN_3 , HNC , HNO , HNO_2 , HNO_3 , HO_2 , HO_2^- , N , NCN , N_2H_2 , N_2O , N_2O_3 , N_3 , NCO , NH , NH_2 , NH_3 , NH_2OH , NO , NO^+ , NO_2 , NO_2^- , O^- , O , O_2^- , O_2^+ , O_3 , OH , OH^- , e^- , C_2O , CH , CH_3O , CH_3OH , CN^- , CO_2^+ , NH_4^+ , NO_2^+ , NO_3^- , OH^+ , H_3^+ , CO^+ , NH_2NO_2 , N_2H_4 , C_2N_2 , C_2H_2 , N_2O_4 , C_3O_2 , C^* (сажа), теплофизические свойства которых заимствованы из [22-25]. Варьировалось начальное значение давления p_0 , параметры за детонационной волной Чепмена Жуге показаны на графиках рис. 4 при двух разных моделях газа.

Расчеты показывают, что при заданном диапазоне параметров (p_0, p_1) справа реализуется детонационная волна Чепмена-Жуге с примыкающим к ней веером волн разрежения (ВВР+ДВ), слева в инертном газе – УД или ВВР. Примеры результатов

моделирования с учетом реальных свойств газа для каждой конфигурации приведены в таблице 2. В последнем столбе при ВВР указываются скорость ДВ Чепмена-Жуге и координата ξ крайней характеристики веера волн разрежения, при УВ слева – скорость распространения УВ по инертному газу.

Табл. 2

| p_0 , МПа | p_1 , МПа | Конфигурация | p , МПа | T , К | u , м/с | Скорость УВ, ВВР, м/с |
|-------------|-------------|--------------------------------|-----------|-------------------|-----------|------------------------------|
| 0,5 | 50 | Вправо – ВВР+УВ Влево - ВВР | 5,42 | 2672,52 123,41 | 404,16 | 1837,37; -176,97 - 206,91 |
| 2 | 5 | Вправо – ВВР+УВ Влево – УВ | 11,24 | 2424,81 421,73 | -170,91 | 1893,07; 844,42 612,05 |

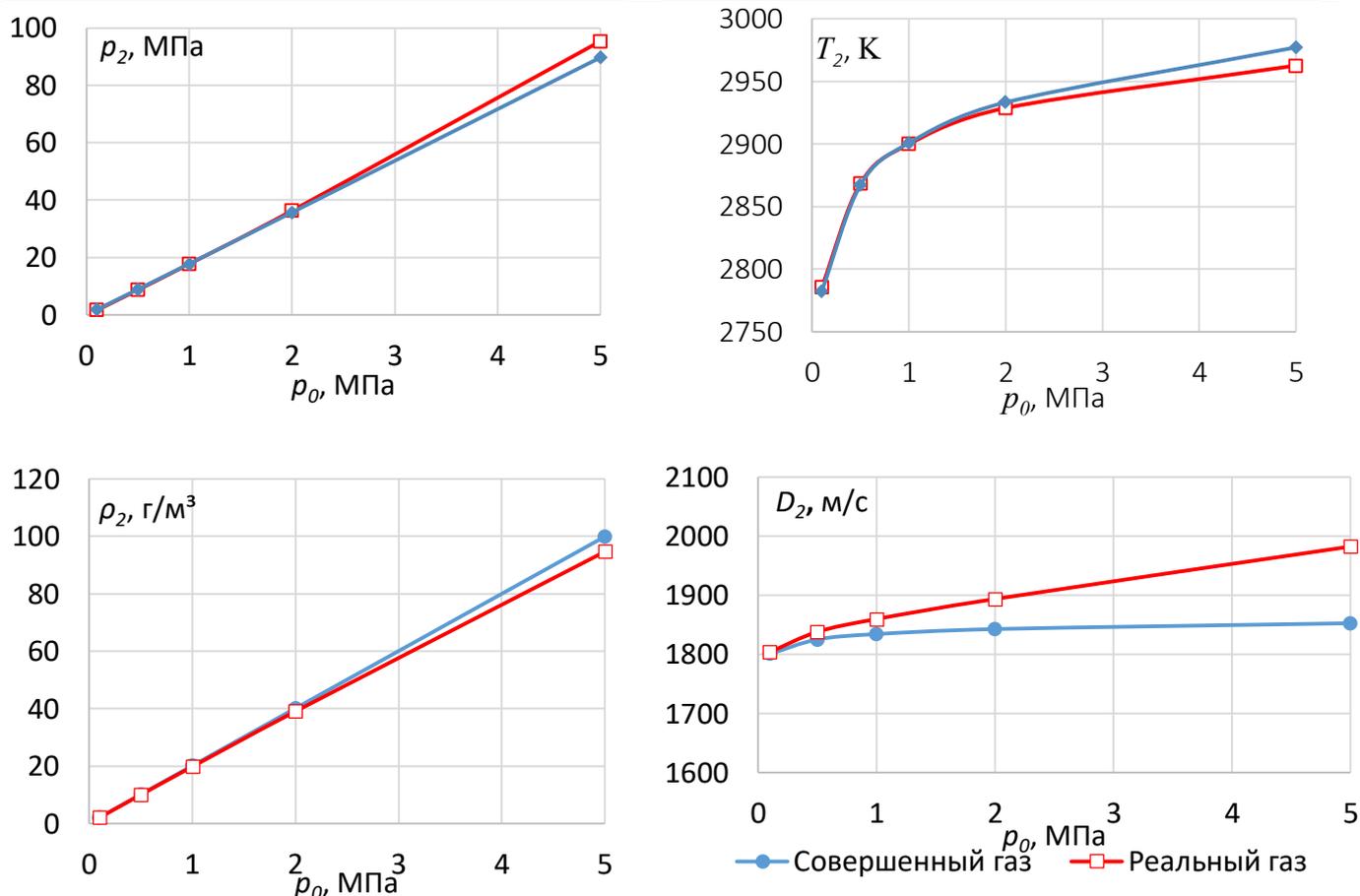


Рис. 4 – Зависимости давления, температуры, плотности и скорости волны в точке ЧЖ от начального давление при разных моделях газа.

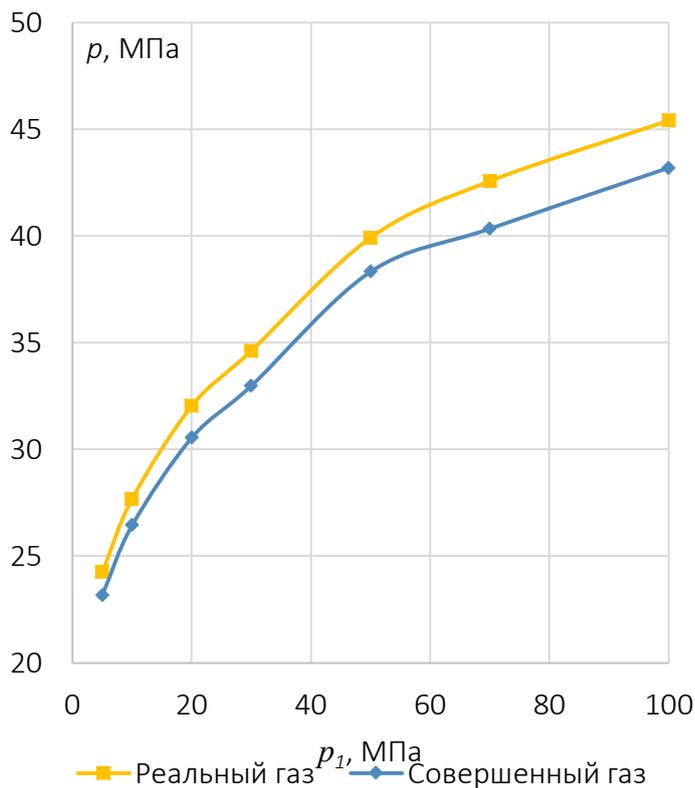


Рис. 5а – Изменение давления на контактном разрыве в зависимости от давления инертного газа при начальном давлении в горючей смеси $p_0 = 5 \text{ МПа}$.

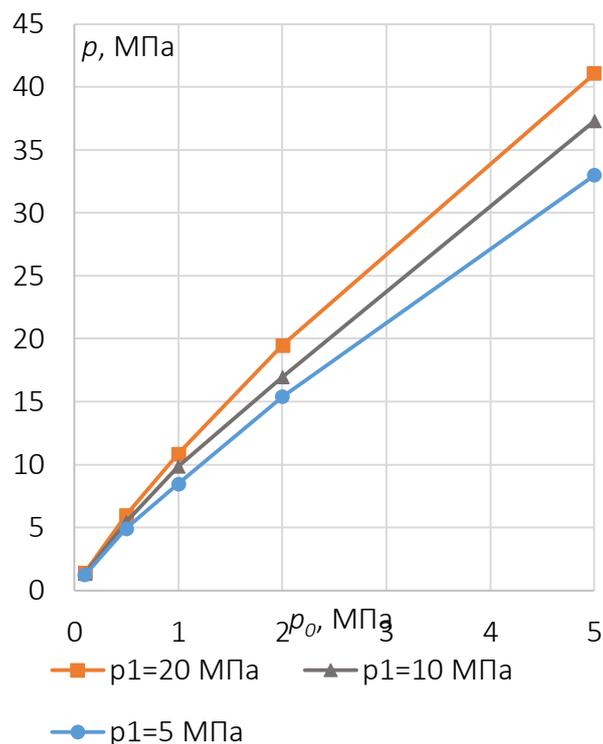


Рис. 5б – Зависимости давления на контактном разрыве от изменения начального давления горючего при различных давлениях Ar .

Результаты моделирования показали, что при начальном давлении горючей смеси $p_n = 5 \text{ МПа}$ давление на контактном разрыве для модели реального газа превышает на 4-5% (рис. 4-9), при этом давление в точке ЧЖ отличается приростом на 6,4% - $p_{II} = 95,33 \text{ МПа}$ для реального газа, 89,61 МПа для совершенного. На значение температуры и скорости на КР вид модели газа оказывает малое влияние. Наблюдается монотонный рост давления на контактном разрыве при увеличении давления, как и в инертном газе, так и в горючей смеси. Возрастание p_0 приводит к

большому приросту давления на разрыве. Так при фиксированном $p_1 = 10 \text{ МПа}$ при увеличении начального давления горючего газа от 2 МПа до 5 МПа прирост давления на КР составляет $\Delta p = 14,7 \text{ МПа}$. Из анализа химического состава продуктов сгорания справа от КР (табл. 3) следует, что при модели реального газа снижение давление на КР оказывает существенное влияние, равновесные концентрации продуктов рекомбинации таких, как H_2O , CO_2 возрастают, при этом снижаются концентрации CO (рис. 10, 11), O , OH . При расчетных давлениях $p_0 = 5 \text{ МПа}$, $p_1 = 100 \text{ МПа}$ мольная доля CO снижается на 14,01%, O – 13,18%, OH – 9,33%.

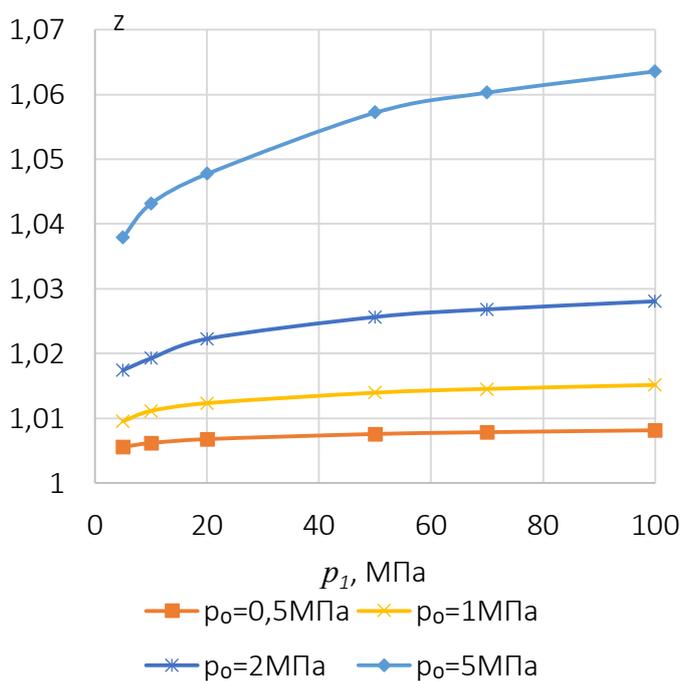


Рис. 6 – Влияние заданных давлений на параметр сжимаемости газа z .

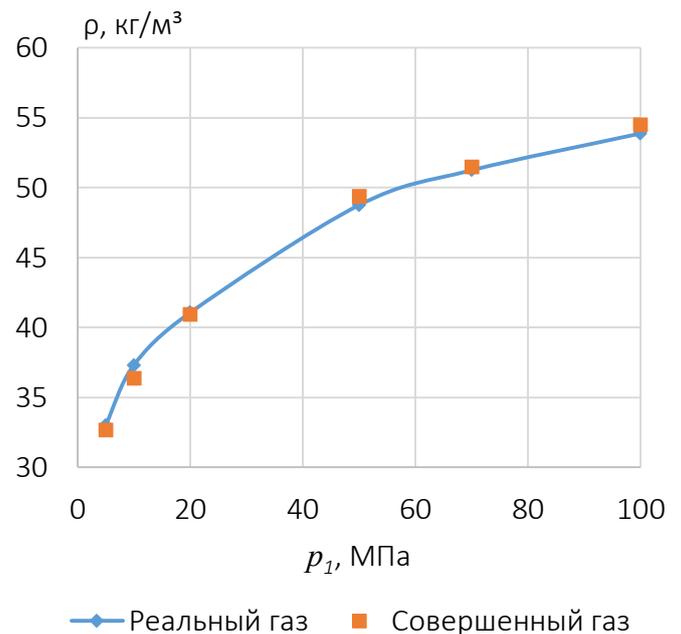


Рис. 7 – Изменение плотности смеси в детонационной волне направо при $p_0 = 5 \text{ МПа}$ для разных моделей газа.

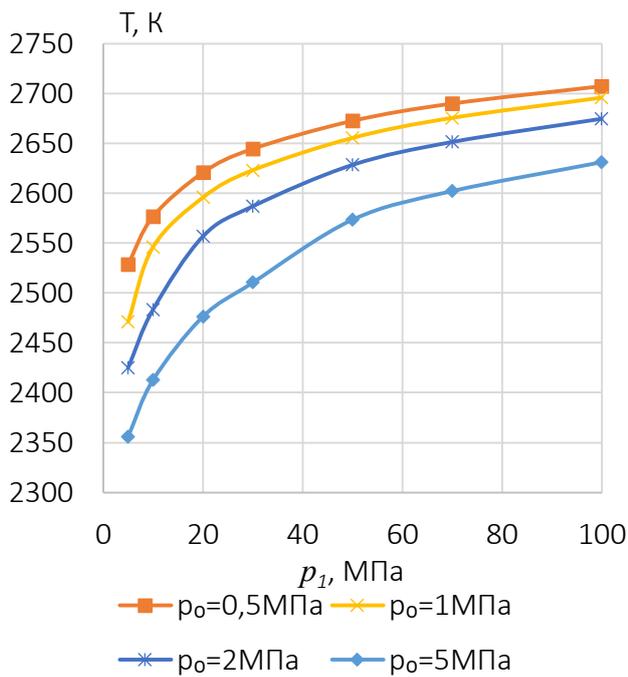


Рис. 8 – Зависимости температуры горючей смеси справа от контактного разрыва от давления для модели реального газа.

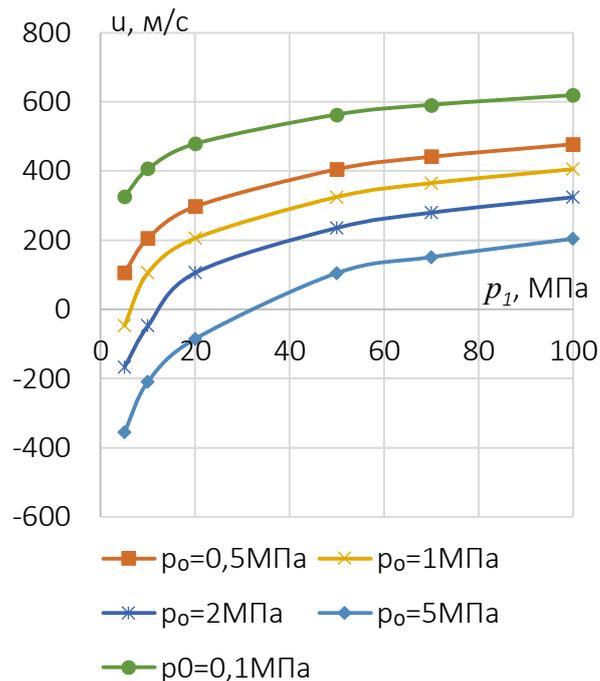


Рис. 9 – Закон изменения скорости контактного разрыва для модели совершенного газа.

Табл. 3

| p_1 , МПа | [CO], моль/кг | | [O], моль/кг | | [OH], моль/кг | | [CO ₂], моль/кг | | [H ₂ O], моль/кг | |
|----------------|---------------|-------------|--------------|-------------|---------------|-------------|-----------------------------|-------------|-----------------------------|-------------|
| | Реальный газ | Соверш. газ | Реальный газ | Соверш. газ | Реальный газ | Соверш. газ | Реальный газ | Соверш. газ | Реальный газ | Соверш. газ |
| 5 | 0,0993 | 0,1074 | 0,0005 | 0,0006 | 0,0314 | 0,0288 | 3,3285 | 3,3205 | 6,7868 | 6,7820 |
| 10 | 0,1184 | 0,1281 | 0,0007 | 0,0008 | 0,0383 | 0,0350 | 3,3095 | 3,2997 | 6,7780 | 6,7722 |
| 20 | 0,1422 | 0,1539 | 0,0009 | 0,0011 | 0,0471 | 0,0430 | 3,2856 | 3,2740 | 6,7670 | 6,7600 |
| 50 | 0,1837 | 0,2011 | 0,0015 | 0,0017 | 0,0637 | 0,0573 | 3,2442 | 3,2268 | 6,7480 | 6,7374 |
| 70 | 0,1971 | 0,2129 | 0,0017 | 0,0019 | 0,0680 | 0,0620 | 3,2308 | 3,2149 | 6,7418 | 6,7317 |
| 100 | 0,2111 | 0,2294 | 0,0019 | 0,0022 | 0,0739 | 0,0670 | 3,2168 | 3,1985 | 6,7354 | 6,7238 |

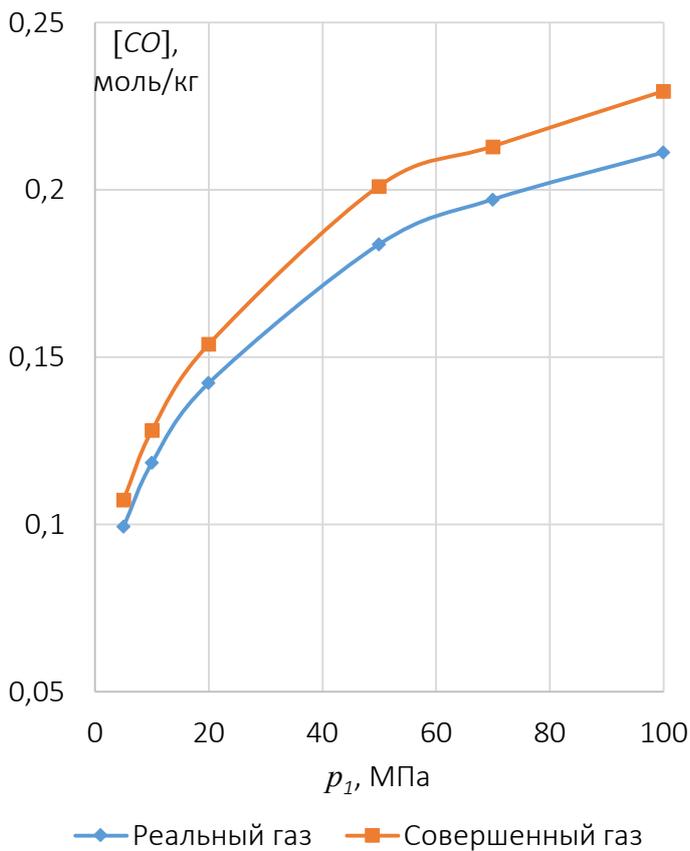


Рис. 10. Сравнение концентраций CO при $p_0=5\text{МПа}$ для разных моделей газа.

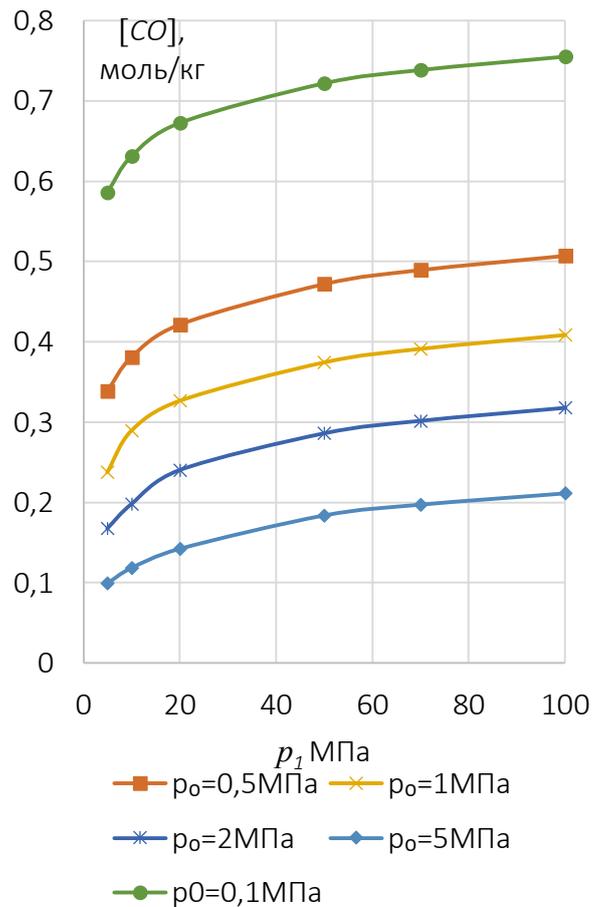


Рис. 11. Зависимость концентрация CO от давлений при модели реального газа

Также была решена задача о распаде разрыве на границе гелий – стехиометрическая водородно-кислородная горючая смесь. Левое полупространство заполнено He с температурой $T_0 = 300K$, давлением $p_0 = 2...100\text{МПа}$. Правое – стехиометрической газовой смесью H_2-O_2 с температурой $T_1 = 300K$ и давлением p_1 , варьируемым от 0,1 до 2МПа (таблица 4).

Табл. 4

| | T | U, кДж/кг | I, кДж/кг | p, МПа | v, м3/kg | ρ, kg/м3 | S, Дж/кг.К |
|---------------|-----|-----------|-----------|--------|----------|----------|------------|
| Левая система | 300 | 5,853 | 9,695 | 2 | 0,3116 | 3,209 | 25299,36 |

| | T | U, кДж/кг | I, кДж/кг | p, МПа | v, м3/kg | ρ , kg/m3 | S, Дж/кг.К |
|-----------------------------|-----|--------------|--------------|--------|----------|----------------|------------|
| He | | | | 5 | 0,1246 | 8,023 | 23395,98 |
| | | | | 10 | 0,0623 | 16,047 | 21956,13 |
| | | | | 20 | 0,0312 | 32,093 | 20516,28 |
| | | | | 50 | 0,0125 | 80,234 | 18612,90 |
| | | | | 100 | 0,0062 | 160,467 | 17173,05 |
| Правая система 2H2+O2 | 300 | 3,987 | 5,268 | 0,10 | 2,0787 | 0,48 | 13408,54 |
| | | | | 0,50 | 0,4157 | 2,41 | 12293,37 |
| | | | | 0,70 | 0,2970 | 3,37 | 12060,23 |
| | | | | 1,00 | 0,2079 | 4,81 | 11813,09 |
| | | | | 1,50 | 0,1386 | 7,22 | 11532,14 |
| | | | | 2,00 | 0,1039 | 9,62 | 11332,81 |
| | | | | 3,00 | 0,0693 | 14,43 | 11051,87 |
| | | | | 4,00 | 0,0520 | 19,24 | 10852,53 |
| | | | | 5,00 | 0,0416 | 24,05 | 10697,92 |

В расчетную модель входит 23 веществ: O_2 , H_2 , H^+ , H^- , H , H_2^+ , H_2O^+ , H_2O , H_2O_2 , H_3^+ , H_3O^+ , HO_2 , HO_2^- , O^- , O , O^+ , O_2^- , O_2^+ , O_3 , OH , OH^+ , OH^- , e^- .

Анализ полученных результатов показал, что при начальном давлении $p_0 \geq 0,5 \text{ МПа}$ направо распространяется волна разрежения, примыкающая к детонационной волне Чепмена-Жуге (рис. 12 - 16). При этом давление детонации Чепмена-Жуге в зависимости от начального давления p_0 может отличаться на 5,67%, если использовать модель реального газа. При $p_0 = 0,1 \text{ МПа}$, $p_1 \geq 50 \text{ МПа}$ реализуется пересжатная волна детонации.

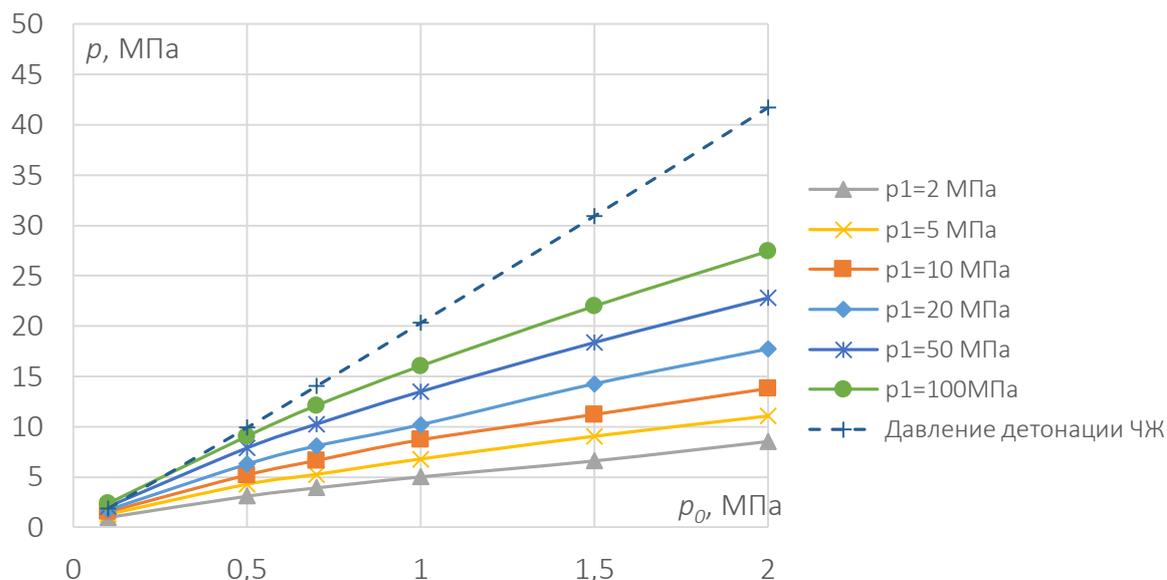


Рис. 12. Изменение давления на контактном разрыве при различных давлениях начальной системы и инертного газа с учетом реальных свойств газа

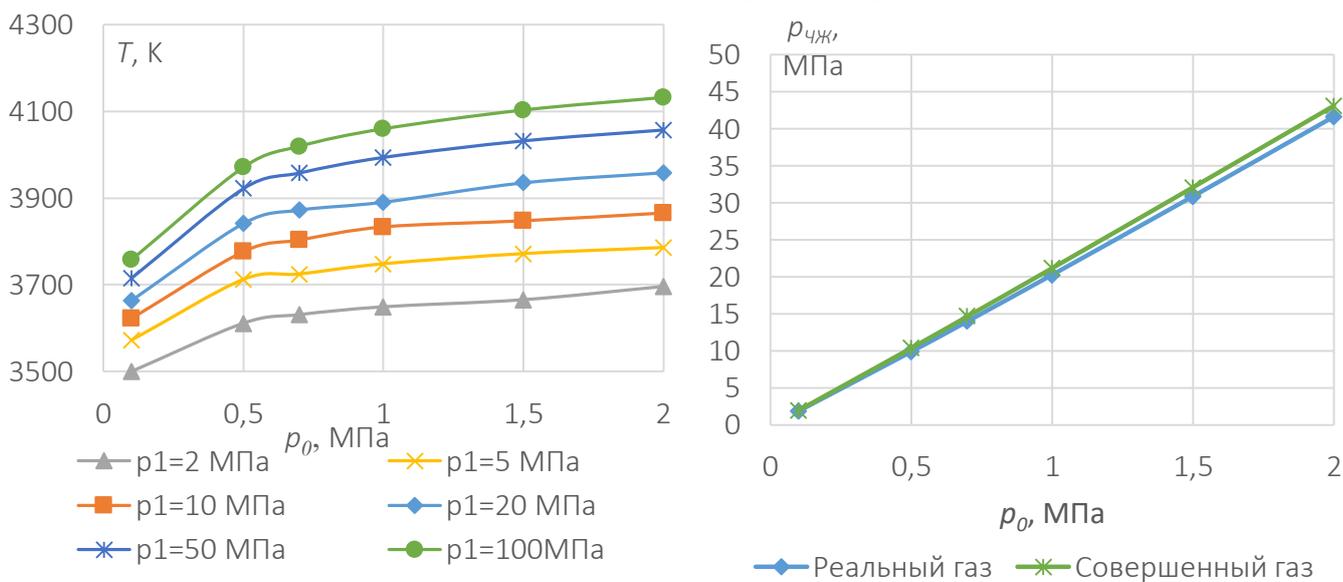


Рис. 13. Изменение температуры справа контактного разрыва при различных давлениях начальной системы и инертного газа

Рис. 14. Сравнение давления в детонационной волне ЧЖ для разных моделей газа

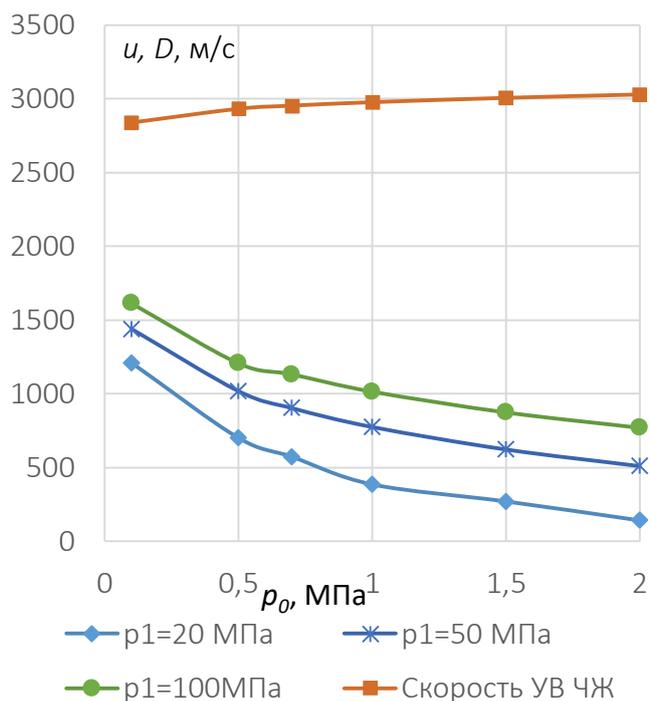


Рис. 15. Скорость газа на контактном разрыве u и детонационной вольны D в зависимости от начального давления смеси

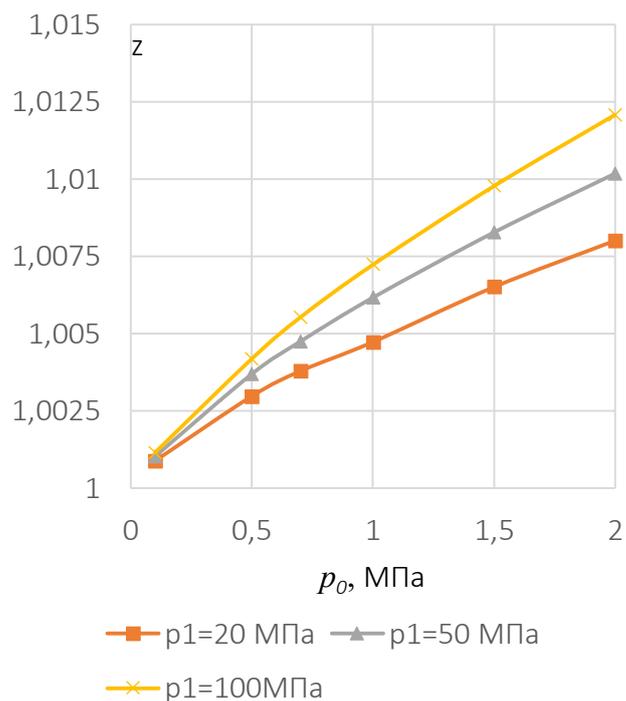


Рис. 16. Параметр сжимаемости термодинамической системы справа от контактного разрыва в зависимости от давлений

Заключение

В работе приведены вычислительные алгоритмы решения задачи о распаде произвольного разрыва на границе между инертным и детонирующим газами. Для описания свойств детонирующего газа использовались уравнения состояния совершенного и реального газов. Были рассмотрены две газофазные системы. Первая – включает в качестве инертного газа - аргон, детонирующего газа – стехиометрическую метано-воздушную смесь. Вторая – в качестве инертного газа – гелий, детонирующего – стехиометрическую водородо-кислородную смесь. Исследовано влияние начального давления на степень отличия результатов,

полученных при использовании уравнений состояния реального и совершенного газов. Получены зависимости параметров детонационных волн и коэффициента сжимаемости от начального давления.

Список источников

1. Jouget E. On the propogation of chemical reaction in gases // Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics, 1905, Online ISSN: 1443-5756, no. 7, pp. 347-425.
2. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. – М.: Изд-во АН СССР, 1944. - 71 с.
3. Бам-Зеликович Г.М. Распад произвольного разрыва в горючей смеси // Теоретическая гидромеханика. 1949. № 4. С. 112-141.
4. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. - М.: Наука, 1976. - 400 с.
5. Черный Г.Г. Газовая динамика. - М.: Наука, 1988. - 424 с.
6. Гидаспов В.Ю. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе // Математическое моделирование. 2006. Т. 18. № 8. С. 64-76.
7. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Некоторые задачи физической газовой динамики. - М.: Изд-во МАИ, 2016. - 196 с.
8. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. - М.: Научный Мир, 2002. - 184 с.

9. Орленко Л.П. Физика взрыва. - М.: Физматлит, 2004. Т 1. - 832 с.
10. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом // Труды МАИ. 2013. № 66. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=40233>
11. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц алюминия с воздухом // Труды МАИ. 2011. № 49. URL: https://trudymai.ru/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3
12. Гидаспов В.Ю. Распад разрыва в детонирующем газе // Вестник Московского авиационного института. 2010. Т. 17. № 6. С. 72-79.
13. Погосбемян М.Ю., Сергиевская А.Л., Крупнов А.А. Сравнительное моделирование процесса диссоциации молекул N₂ в термически неравновесных условиях // Труды МАИ. 2018. № 102. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=98822>
14. Кули-заде М.Е., Решетникова О.Ф., Скороход Е.П. Разработка кинетических моделей движущейся плазмы. Коэффициенты Эйнштейна для иона ксенона // Труды МАИ. 2018. № 98. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=90094>
15. Назырова Р.Р. Вариационное исчисление как фундамент исследования течения среды при учете уравнения состояния реальных газов // Труды МАИ. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76946>
16. Назырова Р.Р. Вариационные принципы термодинамики как основа расчета многофазного течения // Математическое моделирование. 2018. Т. 30. № 1. С. 76-90.

17. Зыонг Минь Дык. Особенность численного моделирования при построении равновесной адиабаты продуктов сгорания с использованием уравнения реального газа // Труды МАИ. 2021. № 120. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=161415>. DOI: [10.34759/trd-2021-120-03](https://doi.org/10.34759/trd-2021-120-03)
18. Зыонг Минь Дык, Гидаспов В.Ю. Вычислительный алгоритм расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированной фазы // Труды МАИ. 2020. № 112. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=116331>. DOI: [10.34759/trd-2020-112-4](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-4)
19. Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкости / Пер. с англ. - М.: Изд-во Иностранной литературы, 1961. - 929 с.
20. Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. - М.: Наука, 1982. - 584 с.
21. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических смесях. - М.: Металлургия, 1994. - 352 с.
22. Недоступ В.И., Галькевич Е.П., Каминский Е.С. Термодинамические свойства газов при высоких температурах и давлениях. Киев: Наука думка, 1990. - 196 с.
23. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник в 4-х т. / Под редакцией В.П. Глушко.- М.: Наука, 1978.
24. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. -Л.: Химия, 1982. - 592 с.

25. Рябин В.А., Остроумов М.А., Свит Т.Ф. Термодинамические свойства веществ: Справочник. - Л.: Химия, 1977. – 392 с.

References

1. Jouget E. On the propagation of chemical reaction in gases, *Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics*, 1905, Online ISSN: 1443-5756, no. 7, pp. 347-425.
2. Zel'dovich Ya.B. *Teoriya goreniya i detonatsii gazov* (Theory of combustion and detonation of gases), Moscow, Izd-vo AN SSSR, 1944, 71 p.
3. Bam-Zelikovich G.M. *Teoreticheskaya gidromekhanika*, 1949, no. 4, pp. 112-141.
4. Godunov S.K., Zabrodin A.V., Ivanov M.Ya., Kraiko A.N., Prokopov G.P. *Chislennoe reshenie mnogomernykh zadach gazovoi dinamiki* (Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics), Moscow, Nauka, 1976, 400 p.
5. Chernyi G.G. *Gazovaya dinamika* (Gas dynamics), Moscow, Nauka, 1988, 424 p.
6. Gidasпов V.Yu. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2006, vol. 18, no. 8, pp. 64-76.
7. Gidasпов V.Yu., Severina N.S. *Nekotorye zadachi fizicheskoi gazovoi dinamiki* (Some problems of physical gas dynamics), Moscow, Izd-vo MAI, 2016, 196 p.
8. Belov G.V. *Termodinamicheskoe modelirovanie: metody, algoritmy, programmy* (Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs), Moscow, Nauchnyi Mir, 2002, 184 p.
9. Orlenko L.P. *Fizika vzryva* (Explosion physics), Moscow, Fizmatlit, 2004, vol. 1, 832 p.

10. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2013, no. 66. URL: <https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=40233>
11. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2011, no. 49. URL: https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3
12. Gidaspov V.Yu. *Vestnik Moskovskogo aviatsionnogo instituta*, 2010, vol. 17, no. 6, pp. 72-79.
13. Pogosbekyan M.Yu., Sergievskaya A.L., Krupnov A.A. *Trudy MAI*, 2018, no. 102. URL: <https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=98822>
14. Kuli-zade M.E., Reshetnikova O.F., Skorokhod E.P. *Trudy MAI*, 2018, no. 98. URL: <https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=90094>
15. Nazyrova R.R. *Trudy MAI*, 2017, no. 92. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=76946>
16. Nazyrova R.R. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2018, vol. 30, no. 1, pp. 76-90.
17. Duong Minh Dyk. *Trudy MAI*, 2021, no. 120. URL: URL: <https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=161415>. DOI: [10.34759/trd-2021-120-03](https://doi.org/10.34759/trd-2021-120-03)
18. Duong Minh Dyk., Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2020, no. 112. URL: URL: <https://trudymai.ru/eng/published.php?ID=116331>. . DOI: [10.34759/trd-2020-112-4](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-4)
19. Girshfel'der D., Kertiss Ch., Berd R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkosti* (Molecular theory of gases and liquids), Moscow, Izd-vo Inostrannoi literatury, 1961, 929 p.

20. Gibbs Dzh. V. *Termodinamika. Statisticheskaya mekhanika* (Thermodynamics. Statistical mechanics), Moscow, Nauka, 1982, 584 p.
21. Vatolin N.A., Moiseev G.K., Trusov B.G. *Termodinamicheskoe modelirovanie v vysokotemperaturnykh neorganicheskikh smesyakh* (Thermodynamic modeling in high-temperature inorganic mixtures), Moscow, Metallurgiya, 1994, 352 p.
22. Nedostup V.I., Gal'kevich E.P., Kaminskii E.S. *Termodinamicheskie svoistva gazov pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh* (Thermodynamic properties of gases at high temperatures and pressures), Kiev, Nauka dumka, 1990, 196 p.
23. Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. et al. *Termodinamicheskie svoistva individual'nykh veshchestv* (Thermodynamic properties of individual substances), Moscow, Nauka, 1978.
24. Rid R., Prausnits Dzh., Shervud T. *Svoistva gazov i zhidkosti* (Properties of gases and liquids), Leningrad, Khimiya, 1982, 592 p.
25. Ryabin V.A., Ostroumov M.A., Svit T.F. *Termodinamicheskie svoistva veshchestv* (Thermodynamic Properties of Substances), Leningrad, Khimiya, 1977, 392 p.

Статья поступила в редакцию 22.03.2022; одобрена после рецензирования 14.03.2022; принята к публикации 20.04.2022.

The article was submitted on 22.03.2022; approved after reviewing on 14.03.2022; accepted for publication on 20.04.2022.