

МЕХАНИКА

Научная статья

УДК 533.27

DOI: [10.34759/trd-2021-120-03](https://doi.org/10.34759/trd-2021-120-03)

Особенности численного моделирования равновесной ударной адиабаты при использовании уравнения состояния реального газа

Зыонг Минь Дык

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

dmd.lqd@gmail.com

Аннотация. Представлены физико-математические модели равновесной одномерной детонации с учетом уравнения состояния реального газа. Приведен оригинальный вычислительный алгоритм для построения равновесной детонационной адиабаты с применением упрощенного вириального уравнения состояния реального газа. Проведено исследование детонационных характеристик метано-воздушной горючей смеси при различных начальных условиях. В частности, получено, что скорость детонации Чепмена-Жуге при повышенных начальных давлениях может более чем на 10% превышать рассчитанную по идеальной модели. На основе анализа результатов численного моделирования подтверждена необходимость учитывать свойства реального газа для детонирующих смесей в области высоких давлений.

Труды МАИ. 2021. Выпуск № 120

Trudy MAI. 2021. Issues no.120

Ключевые слова: реальный газ, горение и детонация, термодинамическое равновесие, равновесная детонационная адиабата, математическое моделирование, энергетические установки, метано-воздушная горючая смесь, углеводородное топливо, экстремум термодинамических функций

Для цитирования: Зыонг Минь Дык. Особенности численного моделирования равновесной ударной адиабаты при использовании уравнения состояния реального газа // Труды МАИ. 2021. № 120. DOI: [10.34759/trd-2021-120-03](https://doi.org/10.34759/trd-2021-120-03)

MECHANICS

Original article

Features of numerical simulation of the equilibrium shock adiabat using the equation of state for a real gas

Duong Minh Duc

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia

dmd.lqd@gmail.com

Abstract. The article presents physico-mathematical models of equilibrium one-dimensional detonation with account for the real gas state equation. An original computational algorithm is presented for plotting an equilibrium detonation adiabat employing a simplified real gas state virial equation. Specifics of the numerical simulation algorithm implementation employing the real gas state virial equation are analyzed. Single-fluid approximation, according to which the extra additive, associated with the existence of the intermolecular interaction, appears in the equations of the real gas thermo-

dynamic functions for transition from the pure gas state equation to the combustion products as a model of mixture was employed. The results of comparing the problem solution on the equilibrium parameters computing of the stoichiometric methane-air mixture combustion products at the constant specific volume and internal energy with the known literature data are presented for the developed algorithms verification. The difference was less than 1%. The perfect gases model application at high initial pressure may lead to the pressure dissimilarity from the real gas model by more than 30%. A study of equilibrium adiabat characteristics detonation products of a stoichiometric mixture of methane and air for initial pressures up to 50 atm was conducted. In this case, the perfect gas model application leads to the pressure decrease behind the detonation front up to 13%. The Chapman-Jouguet detonation velocity at the increased initial pressures may exceed the one calculated by the ideal model by more than 10%. The need to account for the properties of a real gas for detonating mixtures in the high-pressures region was confirmed based on the analysis of the numerical modeling results.

Keywords: Real gas, combustion and detonation, thermodynamic equilibrium, equilibrium detonation adiabat, mathematical modeling, power plants, methane-air combustible mixture, hydrocarbon fuel, extremum of thermodynamic functions

For citation: Duong Minh Duc. Features of numerical simulation of the equilibrium shock adiabat using the equation of state for a real gas. *Trudy MAI*, 2021, no. 120. DOI:

[10.34759/trd-2021-120-03](https://doi.org/10.34759/trd-2021-120-03)

Введение

Последние годы стал актуальным вопрос об исследовании и реализации детонационных процессов для создания перспективных энергосиловых установок, стендового и технологического оборудования [1]. Наиболее ярким примером являются детонационные двигатели, предназначенные для будущих высокоскоростных летательных аппаратов. В работах [2, 3, 4, 5] приведены результаты экспериментальных и теоретических исследований детонационных режимов горения различных топливных смесей при широком диапазоне изменения соотношения компонентов и начальных температуры и давления. В большинстве этих работ при определении параметров детонационных волн не были учтены свойства реального газа, которые оказывают заметное влияние при повышенном давлении, наблюдаемом при детонации.

В настоящей работе на примере горючей смеси метана с воздухом рассматривается применение уравнения состояния с тремя вириальными коэффициентами для уточнения детонационных характеристик горючих смесей.

Физико-математическая модель

В детонационной волне имеется переходная зона в которой происходят неравновесные химические превращения [6, 7, 8, 9], в которой исходное горючее вещество превращается в продукты детонации. Характерная длина переходной зоны Δx часто составляет доли миллиметра, а радиус кривизны зоны фронта $R \geq \Delta x$. При решении целого ряда задач теории детонации переходную зону можно заменить сильным газодинамическим разрывом [10, 11]. При построении физико-

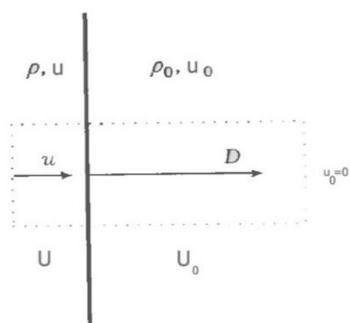
математической модели детонационной волны [11] принимаются следующие допущения:

- процесс детонации является стационарным;
- продукты детонации находятся в химическом и фазовом равновесии;
- смесь продуктов детонации рассмотрена как изолированная газовая система

без энергетического взаимодействия и обмена массы с окружающей средой.

Выпишем соотношения Ренкина – Гюгонио между величинами до и после скачка уплотнения, используя систему координат, в которой исходное вещество покоится ($u_0 = 0$):

$$\begin{cases} \rho(u - D) = \rho_0 D \\ p(\rho, T, \gamma_i) - p_0 = \rho_0 u D \\ p(\rho, T, \gamma_i) u = \rho_0 D (U + \frac{u^2}{2} - U_0) \end{cases} \quad (1)$$



Здесь u, D, ρ, p, U, T соответственно скорость газа за скачком, скорость фронта детонации, плотность, давление, внутренняя энергия и температура. Содержание компонентов газовой фазы выражены в молях на единицу массы и обозначены γ_i ($i=1, 2, \dots, N$). Индекс «0» обозначает параметры потока перед скачком, параметры без индекса соответствуют течению за скачком.

Из системы (1) могут быть получены основные соотношения:

- адиабата Гюгонио:

$$U - U_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0) = 0, \quad (2.1)$$

$$\text{или } H - H_0 - \frac{1}{2}(p - p_0)(v + v_0) = 0, \quad (2.2)$$

где, H – энтальпия смеси продуктов сгорания;

- скорость газа за скачком

$$u^2 = (p - p_0)(v_0 - v); \quad (3)$$

- скорость фронта детонации:

$$D^2 = v_0^2 \frac{p - p_0}{v_0 - v} \quad (4.1)$$

$$\text{или прямая Михельсона } (p - p_0) + \frac{D^2}{v_0^2}(v - v_0) = 0 \quad (4.2)$$

где v - удельный объем.

Любое из уравнений (2.1) и (2.2) определяет кривую Гюгонио в фазовой плоскости (p, v) , которая описывает все возможные состояния газовой смеси за скачком. Если функция $U(p, v)$ определена для термодинамически равновесного состава продуктов сгорания, то будем иметь равновесную кривую Гюгонио - детонационную адиабату. В большинстве случаев расчет параметров детонации проводят для точки Чепмен-Жуге (ЧЖ). Иногда рассчитывают параметры в точке на равновесной детонационной адиабате. В обоих случаях расчет сводится к решению системы уравнений (2)-(4) совместно с уравнениями состояния и термодинамического равновесия, определяющими состав продуктов детонации. При

этом основные алгоритмические и вычислительные трудности связаны с определением равновесного состава продуктов сгорания.

Как было показано в работах [12, 13], для энергетических установок с высоким рабочим давлением больше 30 МПа приближение идеального газа может оказаться несостоятельным. Для решения инженерных задач используются в основном эмпирические, полуэмпирические и теоретические уравнения состояния реального газа. В рамках настоящего исследования было использовано вириальное уравнение [14, 15]:

$$\frac{pv}{R_0T\gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{C\gamma^2}{v^2} + \frac{D\gamma^3}{v^3} + \dots \text{ или } pv = zR_0T\gamma, \quad (5)$$

где B , C , D – вириальные коэффициенты; z – коэффициент 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.

Уравнение (5) содержит данные о параметрах модельного потенциала Леннард-Джонса ($\varphi(r)$), характеризующего каждое вещество, входящее в состав продуктов детонации [16]:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

где r – расстояние между молекулами; σ – расстояние между частицами, при котором энергия их взаимодействия равна 0; ε – минимальное значение энергии взаимодействия.

Данный потенциал является двухпараметрическим и хорошо описывает взаимодействие молекул в области высоких температур при высоком давлении. Информация о параметрах σ и ε/k (k – константа Больцмана) может быть найдена в различных справочниках [17, 18].

Для определения концентраций компонентов применяются фундаментальные законы термодинамики – закон сохранения энергии и принцип возрастания энтропии. Из второго закона термодинамики следует, что в состоянии равновесия энтропия изолированной системы достигает максимума [19]:

$$S(U, v, \gamma_i) \rightarrow \max_{i=1..N} \quad (6)$$

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

При решении задачи определения максимума энтропии в изолированной системе соблюдается условие сохранения химических элементов:

$$\sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \quad (7)$$

Здесь A_K^i – матрица состава, количество атомов k -ого элемента в i -ом веществе; γ_K^0 – известная из формулы топлива мольно-массовая концентрация k -ого элемента.

При помощи метода неопределенных множителей Лагранжа задачу отыскания координат условного экстремума (6) при обеспечении условий (7) можно свести к системе нелинейных алгебраических уравнений [20]:

$$\mu_i - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i = 0, i = 1, \dots, N \quad (8)$$

Здесь μ_i – химический потенциал i -ого вещества; λ_K – множители Лагранжа.

Как отмечено в [12, 10] формулировка (8) является универсальной и может быть использована для расчета равновесного состояния произвольной термодинамической системы, независимо от того, какой парой термодинамических параметров характеризуется равновесное состояние. Добавив в систему уравнений (8) условия сохранения, уравнение состояния (5) и соотношения (2.1)-(4.2), получим математическую модель для построения равновесной адиабаты.

Особенность численного моделирования в построении равновесной адиабаты

1. Необходимо обратить внимание на то, что вириальное уравнение (5) было написано для чистого газа. Стоит важный вопрос о переходе от уравнения состояния чистого газа к уравнению состояния газовой смеси, поскольку выбранный способ перехода оказывает большое влияние на время вычисления и точность получаемых результатов. Наиболее удачные способы для оценки поведения смеси газов основаны на использовании закона соответственных состояний [14]. В настоящей работе используется однофлюидное приближение [12], при котором параметры для эквивалентного вещества могут быть вычислены по формуле Ван-дер-Ваальса:

$$\sigma_{см}^3 = \sum_i \sum_j x_i x_j \sigma_{ij}^3$$

$$\varepsilon_{см} \sigma_{см}^3 = \sum_i \sum_j x_i x_j \sigma_{ij}^3 \varepsilon_{ij}$$

где $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j) / 2$; $\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}$; $x_i = \gamma_i / \gamma$ - молярная доля i -ого компонента.

Для газа при умеренно высоких давлениях рекомендуется уравнение [14]:

$$\frac{pv}{R_0 T \gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{0,625b_0^2 \gamma^2}{v^2} + \frac{0,2869b_0^2 \gamma^3}{v^3} + \frac{0,1928b_0^2 \gamma^4}{v^4} \quad (9)$$

где B — второй вириальный коэффициент; b_0 — обычная постоянная Ван-дер-Ваальса. Третий и четвертый вириальные коэффициенты справедливы для модели твердых сфер. Пятый вириальный коэффициент выбран таким, чтобы согласовать величину сжимаемости с уравнением Эйринга в диапазоне плотностей, соответствующих жидкому состоянию.

В настоящей работе для реализации алгоритма по построению равновесной адиабаты и расчета характеристик продуктов детонации горючей смеси применен упрощенный вариант уравнения (9):

$$\frac{pv}{R_0 T \gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{0,625b_0^2 \gamma^2}{v^2}; \quad (10)$$

$$B = \sum_i \sum_j B_{ij} x_i x_j = \sum_i \sum_j x_i x_j b_{0ij} B_{ij}^*(T^*); \quad B_{ij} = b_{ij} B_{ij}^*(T^*); \quad b_{ij} = 2\pi N_A \sigma_{ij}^3$$

$$C = 0,625 (2\pi N_A \sigma_{cm}^3)^2 = 0,360 \cdot 10^{-12} (\sigma_{cm}^3)^2;$$

где N_A - число Авогадро; $B^*(T^*)$ - справочное значение второго коэффициента при нулевом давлении для потенциала Леннарда – Джонса в зависимости от безразмерной температуры $T^* = kT/\epsilon$ [21]. Значение $B^*(T^*)$ и графики безразмерных производных первого $B_1^* = T^* (dB^*/dT^*)$ и второго $B_2^* = T^{*2} (d^2B^*/dT^{*2})$ порядка приведены на рис.1.

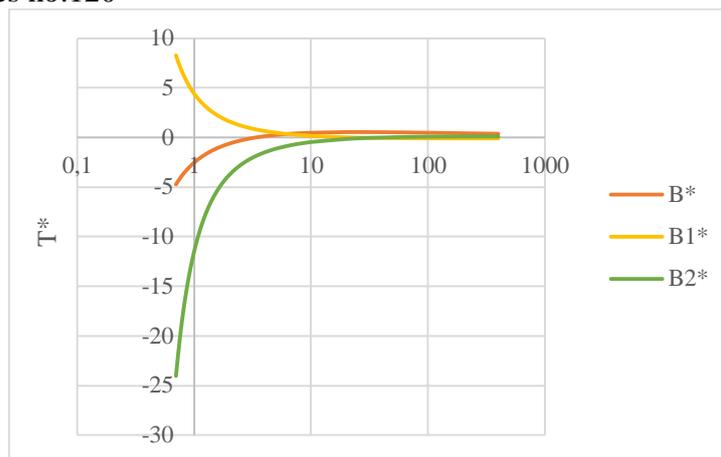


Рис. 1 – Второй вириальный коэффициент при нулевом давлении для потенциала Леннарда – Джонса

2. Значение каждой термодинамической характеристики можно представить в виде суммы двух слагаемых:

$$\Phi = \Phi^{w0} + \Delta\Phi$$

Здесь Φ^{w0} - слагаемое, отвечающее идеальной модели (модели совершенного газа); $\Delta\Phi$ - слагаемое, которое учитывает реальные свойства термодинамической системы. Наличие второго слагаемого обусловлено существованием сил межмолекулярного взаимодействия.

Для смеси газа с уравнением состояния, записанным относительно $T, v, \vec{\gamma}$, формулы для вычисления внутренней энергии, энтальпии, энтропии и химического потенциала имеют вид

$$U = U^{w0} + \Delta U = \sum \gamma_i U_i^0 + \int_v^{\infty} \left(p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \vec{\gamma}} \right);$$

$$H = H^{w0} + \Delta H = \sum \gamma_i H_i + pv - RT\gamma + \int_v^{\infty} \left(p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \vec{\gamma}} \right);$$

$$S = S^{u0} + \Delta S = \sum_i \gamma_i \left(S_i^0 - R \ln \frac{R_0 T \gamma_i}{p_0 v} \right) + \int_v^\infty \left(\frac{R \sum \gamma_i}{v} - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} \right) dv ;$$

$$\mu_i = \mu_i^{u0} + \Delta \mu_i = H_i^0 - T S_i^0 + R T \ln \frac{R T \gamma_i}{p_0 v} + \int_v^\infty \left(\left(\frac{\partial p}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} - \frac{R T}{v} \right) dv .$$

Где $p_0=101325$ Па; $R=8,3144$ Дж/моль/К – универсальная газовая постоянная.

Применив уравнение состояния (10), получим формулы для поправки термодинамических функций:

$$\Delta U = \int_v^\infty \left(p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} \right) dv = - \frac{R T^2 \gamma^2}{v} \left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} ;$$

$$\Delta S = \int_v^\infty \left[\frac{R \gamma T}{v} - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} \right] dv = - \left[\frac{R \gamma^2 (B + T (\partial B / \partial T)_{v, \bar{\gamma}})}{v} + \frac{R C \gamma^3}{2 v^2} \right] ;$$

$$\Delta H = \Delta U + p v - R_0 T \gamma ;$$

$$\frac{\Delta \mu_i}{R T} = \frac{1}{R T} \int_v^\infty \left(\frac{R T}{v} - \left(\frac{\partial p}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} \right) dv = - \left(\left(2 B \gamma + \gamma^2 \left(\frac{\partial B}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} \right) \frac{1}{v} + \left(3 C \gamma^2 + \gamma^3 \left(\frac{\partial C}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} \right) \frac{1}{2 v^2} \right) .$$

Где

$$\left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} = \sum_i \sum_j x_i x_j b_{0ij} \frac{dB_{ij}^*}{dT} ;$$

$$\left(\frac{\partial B}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} = \frac{2 \gamma_i \gamma - 2 \gamma_i^2}{\gamma^3} b_{0i} B_i^* (T_i^*) + \sum_{j \neq i} \frac{2(\gamma - 2 \gamma_i)}{\gamma^3} \gamma_j b_{0ij} B_{ij}^* (T_{ij}^*) ;$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} = 0,72 \cdot 10^{-12} \sigma_{cm}^3 \left(\frac{2 \gamma_i \gamma - 2 \gamma_i^2}{\gamma^3} \sigma_i^3 + \sum_{j \neq i} 2 \frac{\gamma - 2 \gamma_i}{\gamma^3} \gamma_j \sigma_{ij}^3 \right) .$$

3. С учетом внесенных поправок, выпишем систему уравнений для определения равновесного состояния за волной детонации:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \ln \gamma_i = \ln \left(\frac{p_0 v}{RT} \right) + \frac{TS_i^0 - H_i^0}{RT} + \frac{\sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \lambda_j}{R} + \frac{\Delta \mu_i}{RT}, i = 1 \dots N \\
 \sum_{i=1}^{N_e} A_k^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \\
 pv - zRT\gamma = 0 \\
 S_{cm} - \sum_i \gamma_i \left(S_i^0 - R \ln \frac{R_0 T \gamma_i}{p_0 v} \right) - \Delta S = 0 \\
 U_{cm} - \sum_i n_i U_i^0 - \Delta U = 0 \\
 H_{cm} - \sum_i \gamma_i H_i - \Delta H = 0 \\
 U - U_0 + \frac{1}{2} (p + p_0) (v - v_0) = 0, \text{ или } H - H_0 - \frac{1}{2} (p - p_0) (v + v_0) = 0 \\
 P = C
 \end{array} \right. \quad (11)$$

Последним в системе (11) $P = C$ может служить любое дополнительное уравнение в зависимости от того, на какой координате построена равновесная адиабатная характеристика. Реализованный автором алгоритм позволяет решить систему (11), задавав известный параметр термодинамической системы за скачком (p, v, T, H, U, S), или скорость газа u . При заданном u вместо последнего в системе (11) будет уравнение для расчета скорости потока за скачком (3).

Для нахождения детонационной точки ЧЖ последнее уравнение системы (11) принимает вид условия ЧЖ:

$$\frac{p - p_0}{v_0 - v} = - \frac{C_p \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v}{C_v \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p}$$

Система уравнений (11) состоит из двух частей. Шесть первых отражают модель термодинамического равновесия с учетом свойств реального газа, два последние – модель движения газа. Для проверки достоверности первой части проведем вычисление максимального давления в бомбе постоянного объема [6] для

$\Delta H_f^{298} = -2027,4 \text{ кДж/кг}$. Результат со сравнением с данными [12] показан в табл. 1.

Таблица 1 – Максимальное давление в бомбе. Сравнение с данными [12]

Плотность, $г/см^3$	0,0263	0,042	0,0585	0,0755	0,1066	0,1344	0,1546	0,0249
Данные [12]	30,4	50	70,7	94,3	138,7	181,1	213,6	301,2
Настоящая работа	30,5	50	71,3	94,23	136,8	180,84	213,2	300

4. Выше приведенная система уравнений является нелинейной. Для поиска ее решения целесообразно использовать метод Ньютона с параметром релаксации. Суть метода заключается в линеаризации исходной системы уравнений с использованием разложения в ряд Тейлора относительно начального приближения решения $x^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^0) \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$$

Из-за сложности системы не будем линеаризовать ее полностью. Линеаризуем систему (11), предполагая, что поправки $\Delta\mu_i, \Delta S, \Delta U, \Delta H$ являются константами.

Расчет проводится следующим образом. Используя описанный в работе [20, 22] алгоритм, найдем решение системы уравнений, отвечающее приближению смеси совершенных газов, где значения всех поправок равны нулю и $z=1$. Далее на основании полученного решения при помощи уравнения состояния реального газа (10) системы вычисляются значения поправок $\Delta\mu_i, \Delta S, \Delta U, \Delta H$ и z . Подставляем эти

значения в линеаризованные уравнения и находим уточненное решение. Результат вновь используется для вычисления.

Уравнения (2.1), (2.2), (3) после линеаризации имеют следующий вид:

$$I + \left(-0,5k_0e^{-y_1} p^0 + 0,5k_0p_0e^{-y^0}\right)T + \left(-0,5k_0e^{-y^0} - 0,5v_0\right)p + \left(0,5k_0T^0e^{-y^0} p^0 - 0,5k_0p_0T^0e^{-y^0}\right)y + \left(-0,5k_0p^0e^{-y^0}T^0(y^0 - 1) + 0,5k_0p_0y^0T_1e^{-y^0} - I_0 + 0,5p_0v_0\right) = 0$$

$$U + \left(0,5k_0e^{-y^0} y_{p^0} + 0,5k_0p_0e^{-y^0}\right)T + \left(0,5k_0e^{-y^0}T^0 - 0,5v_0\right)p + \left(0,5k_0p_1e^{-y^0}T^0(y^0 - 1) + 0,5p_0k_0y^0T^0e^{-y^0} - U_0 - 0,5p_0v_0\right) = 0$$

$$\left(k_0e^{-y^0} p^0 - k_0p_0e^{-y^0}\right)T + \left(k_0e^{-y^0}T^0 - v_0\right)p + \left(-k_0T_1e^{-y^0} p^0 + p_0k_0T^0e^{-y^0}\right)y + \left(-k_0p^0e^{-y^0}T^0 + k_0y^0T^0e^{-y^0} p^0 - p_0k_0y^0T^0e^{-y^0} + u^2 + p_0v_0\right) = 0$$

Где $k_0 = R / p_0 = const$; $y = \ln(RT / p_0v)$.

Надо обратить внимание на тот случай, когда значение объема не задается с помощью последнего уравнения в системе (11). Из-за нелинейности выбранного уравнения состояния (10) кубическое уравнение для переменного v может иметь несколько действительных корней, в этом случае выбирается из них тот, который отвечает наибольшему объему газовой фазы.

5. Скорость звука определяется по формуле:

$$a^2 = \left(\frac{dp}{d\rho}\right)_s = v^2 \frac{\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p} = v^2 \cdot \frac{C_p}{C_v} \cdot \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p} \quad (12)$$

При этом

$$C_p = \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum \gamma_i H_i^0 + pv - RT\gamma + \Delta U\right)_p = \sum \left(C_{pi}\gamma_i + \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_p H_i^0\right) + \left(\frac{\partial \Delta U}{\partial T}\right)_p + p \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p - R\gamma - RT \left(\frac{\partial \gamma}{\partial T}\right)_p ;$$

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} (\sum \gamma_i U_i^0 + \Delta U)_v = \sum_i \left(\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v U_i^0 + C_{p_i} \gamma_i \right) + \left(\frac{\partial \Delta U}{\partial T} \right)_v;$$

$$\left(\frac{\partial \Delta U}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{\partial \Delta U}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} + \left(\frac{\partial \Delta U}{\partial v} \right)_{T, \gamma} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_v + \sum \left(\frac{\partial \Delta U}{\partial \gamma_i} \right)_{v, T, \gamma_{l \neq i}} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v.$$

Система уравнений для определения производных параметров, входящие в формулу (12), при $p = const$ получится путем дифференцирования 3 первых уравнений системы (11).

$$1) \frac{1}{\gamma_i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p - \frac{1}{T} + \frac{H_i^0}{RT^2} + \frac{1}{R} \sum_{k=1}^{N_e} A_i^k \lambda_k + \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_p, \quad i = 1, \dots, N$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} + \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial v} \right)_{T, \gamma} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p + \sum \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial \gamma_i} \right)_{v, T, \gamma_{l \neq i}} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p$$

$$2) \sum_{i=1}^N A_i^k \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p = 0, \quad k = 1 \dots N_e$$

$$3) p \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p = R z \sum_{i=1}^N \gamma_i + RT z \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p + RT \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p \sum_{i=1}^N \gamma_i$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} + \left(\frac{\partial z}{\partial v} \right)_{T, \gamma} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p + \sum \left(\frac{\partial \Delta z}{\partial \gamma_i} \right)_{v, T, \gamma_{l \neq i}} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p$$

Система уравнений для определения производных параметров при $v = const$

$$1) \frac{1}{\gamma_i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v = \frac{H_i^0}{RT^2} - \frac{1}{T} + \frac{1}{R} \sum_{k=1}^{N_e} A_i^k \lambda_k + \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_v, \quad i = 1, \dots, N$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} + \sum \left(\frac{\partial \Delta \mu_i}{\partial \gamma_i} \right)_{v, T, \gamma_{l \neq i}} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v$$

$$2) \sum_{i=1}^N A_i^k \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v = 0, \quad k = 1 \dots N_e$$

$$3) v \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v = R z \sum_{i=1}^N \gamma_i + RT z \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v + RT \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_v \sum_{i=1}^N \gamma_i$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{v, \bar{y}} + \sum \left(\frac{\partial \Delta z}{\partial \gamma_i} \right)_{v, T, \gamma_{i \neq i}} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v$$

Построение равновесной адиабаты продуктов детонации метана в воздухе в широком диапазоне начального давления с учетом свойств реального газа

Было проведено исследование характеристик равновесной адиабаты для продуктов детонации стехиометрической смеси метана (CH_4) и воздуха при начальном давлении от 1 до 50 атм с использованием различных моделей газа. В состав продуктов детонации метана в воздухе может входить около 150 возможных соединений химических элементов C, H, O, N, Ar . В работе [18] информация о необходимых термодинамических функциях представлена в универсальном виде.

При изменении начального давления p_0 от 1 атм до 50 атм наблюдается смещение точки ЧЖ в сторону большего давления при применении модель реального газа (рис.2). При начальном давлении 50 атм детонационное давление ЧЖ может достигнуть 96,7МПа для модели реального газа и 90,8МПа – совершенного газа. При этом по сравнению с совершенным газом при росте начального давления скорость детонации и скорость звука в точке ЧЖ повышаются, при $p_0 = 50$ атм отличие достигает 13%.

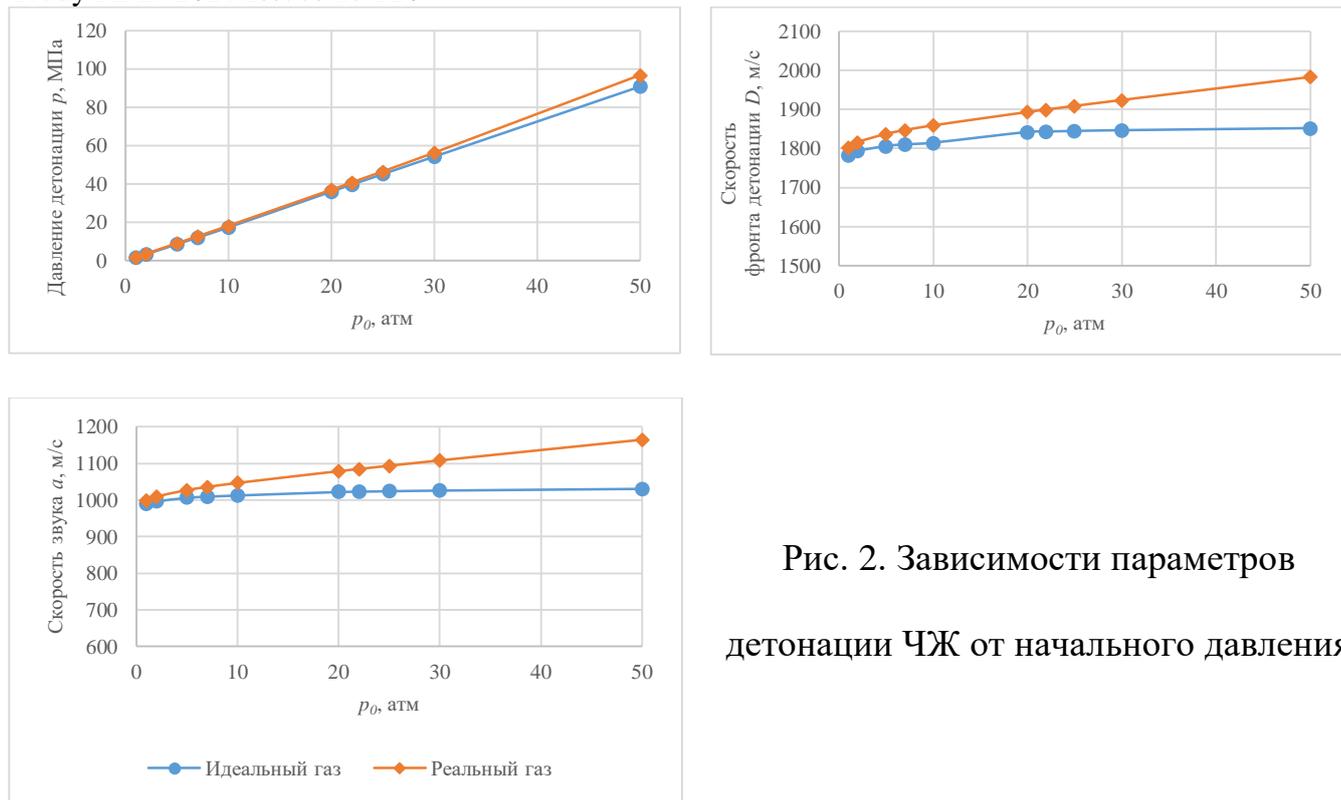


Рис. 2. Зависимости параметров детонации ЧЖ от начального давления

На рис. 3 и 4 представлена равновесная адиабата продуктов сгорания стехиометрической метано-воздушной смеси для начального давления $p_0=1\text{атм}$ и $p_0=10\text{атм}$.

При невысоком начальном давлении характеристики газа для совершенного и реального газа практически совпадают (рис.3). С ростом p_0 диаграммы $p(v)$ и $S(v)$ для реального газа перемещаются вправо в сторону увеличения удельного объема v . Для $p_0=10\text{атм}$ при давлении газа за скачком $p \approx 40\text{МПа}$ наблюдается отличие удельного объема $\Delta v \approx 4\%$, $\Delta a \approx 5\%$ и может увеличиться до 10% для удельного объема и 11% для скорости звука при $p \approx 200\text{МПа}$ (рис. 4). Это отличие может объясниться сжимаемостью газа в модели реального газа. При этом значение температуры T , скорости распространения фронта детонации D практически не меняются для каждого зафиксированного значения давления p .

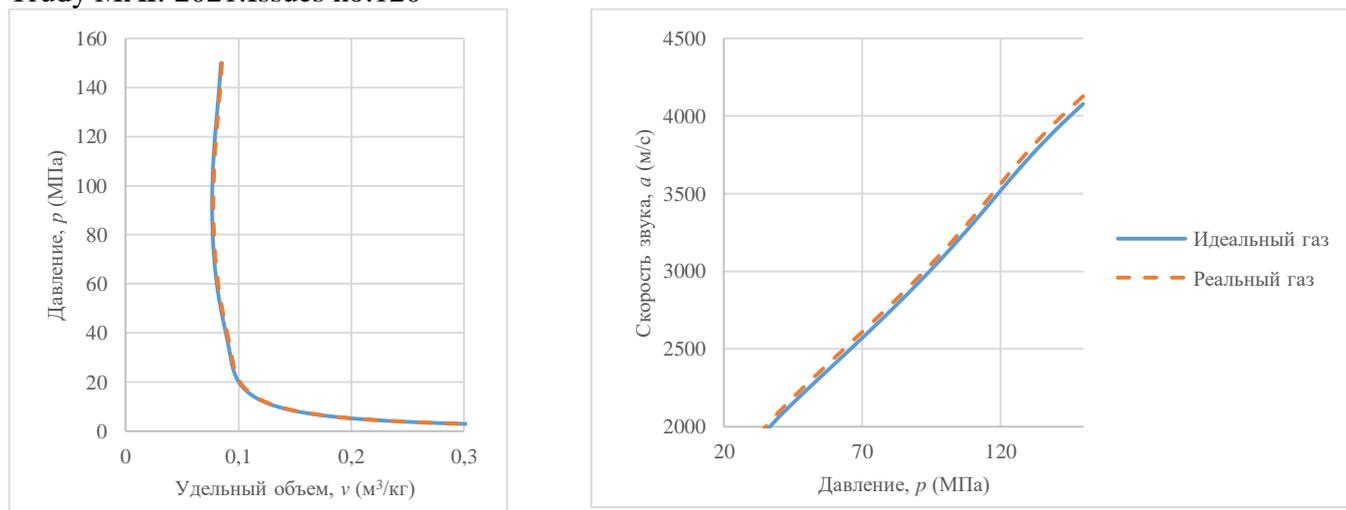


Рис.3 – Равновесная адиабата метана в воздухе при $p_0=1\text{ атм}$

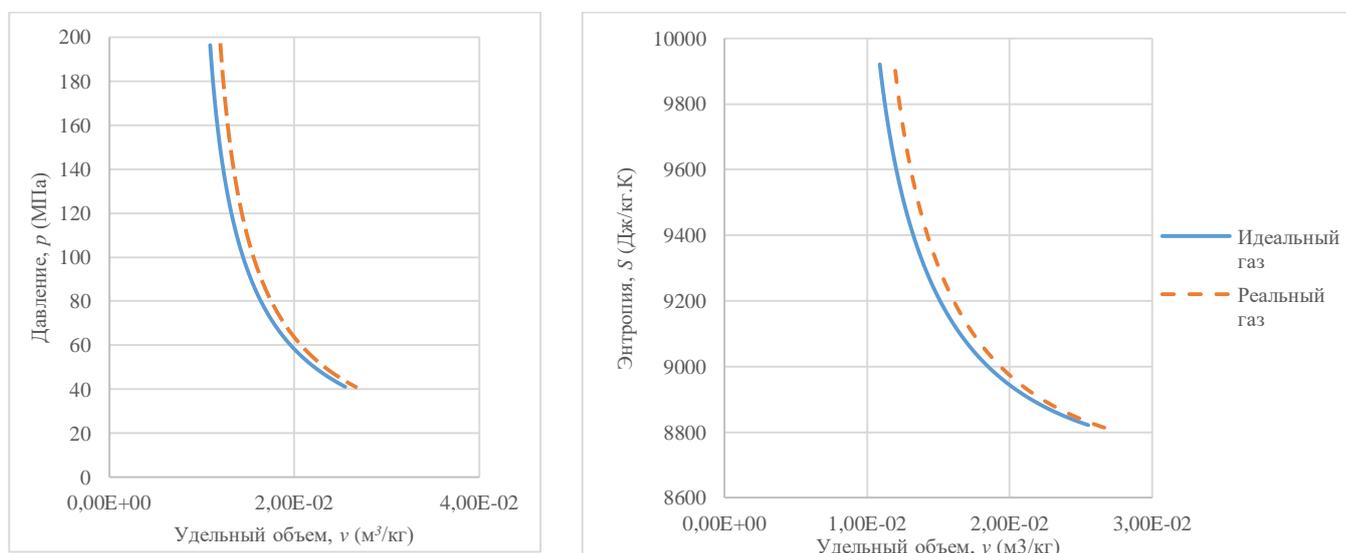


Рис.4 – Равновесная адиабата метана в воздухе при $p_0=10\text{ атм}$

Стоит отметить, что в зоне высокого начального давления p_0 необходимо учитывать свойства реального газа при исследовании характеристик равновесной адиабаты в тех точках, где удельный объем задается относительно маленьким значением. Из-за высокой наклонности характерной диаграммы $p-v$, $S-v$... в области высокого давления результат расчета с использованием модели совершенного газа может существенно отличаться от реального газа (см. табл.2 и рис. 5).

Таблица 2 – Сравнение характеристик при заданном удельном объеме для различных моделей газа

	ν , м ³ /кг	T , К	p , МПа	S , Дж/кг.К	a , м/с	u , м/с	D , м/с
Идеальный газ	0,012	5228,0	148,75	9609,395	1464,789	3365,715	3892,769
Реальный газ	0,012	6001,5	196,39	9900,76	1785,638	3870,729	4476,362
Δ	0%	15%	32%	3%	22%	15%	15%

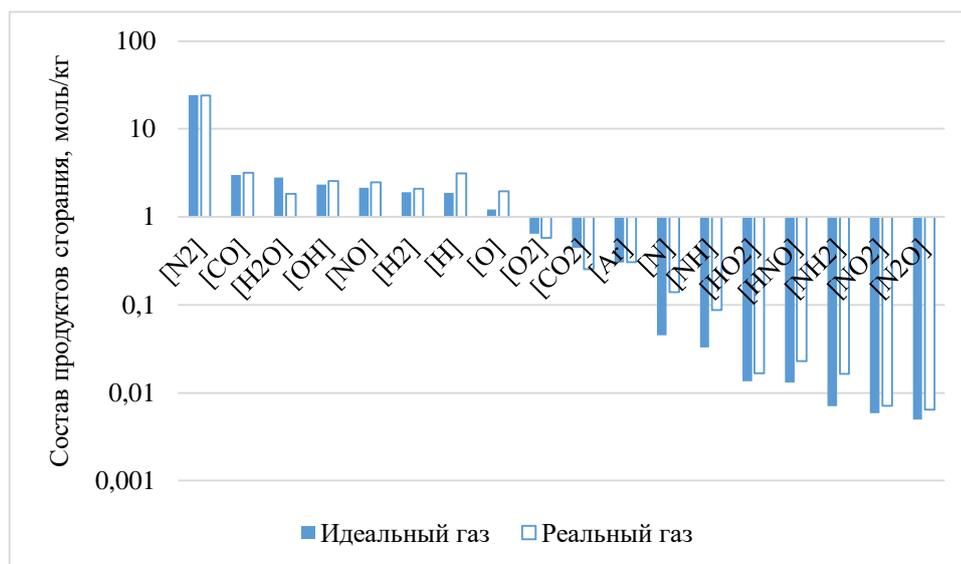


Рис. 5 – Состав продуктов сгорания при $\nu=0,012$ м³/кг; $p_0=10$ атм

Заключение

В работе рассмотрена задача построения равновесной адиабаты в зоне высокого давления при учете свойств реального газа. Проанализированы особенности в реализации алгоритма численного моделирования с использованием

вириального уравнения состояния реального газа. Для перехода от уравнения состояния чистого газа на смесь продуктов сгорания в качестве модели смещения использовано однофлюидное приближение, согласно которому в выражениях для расчета термодинамических функций реального газа появляется дополнительное слагаемое, связанное с существованием сил межмолекулярного взаимодействия. Было проведено исследование характеристик равновесной адиабаты для продуктов детонации стехиометрической смеси метана (CH_4) и воздуха для начальных давлений до 50 атм. При начальном давлении 50 атм детонационное давление Чепмена-Жуге может достигнуть 96,7 МПа. В этом случае использование модели совершенного газа приводит к отклонению по давлению за фронтом детонаций на 13%. При фиксированном объеме результаты расчета с использованием идеального газа при высоком начальном давлении могут существенно отличаться от реального газа – больше 30% по давлению.

Список источников

1. Булат П.В., Денисенко П.В., Волков К.Н. Тенденции разработки детонационных двигателей для высокоскоростных воздушно-космических летательных аппаратов и проблема тройных конфигураций ударных волн. Ч. I. Исследования детонационных двигателей // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2016. Т. 16. № 1. DOI:[10.17586/2226-1494-2016-16-1-1-21](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2016-16-1-1-21)

Труды МАИ. 2021. Выпуск № 120

Trudy MAI. 2021. Issues no.120

2. Александров В.Ю., Арефьев К.Ю., Баскаков А.А., Ильченко М.А. Детонация воздушно-метановых смесей в сверхзвуковом сносящем потоке // Известия высших учебных заведений. Машиностроение. 2017. № 2(683). С. 98-108.

3. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом // Труды МАИ. 2013. № 66. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=40233>

4. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных детонационных волн в смеси частиц алюминия с воздухом // Труды МАИ. 2011. № 49. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3

5. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Некоторые задачи физической газовой динамики. - М.: Изд-во МАИ, 2016. 195 с.

6. Крюков Б.Г., Абдуллин А.Л., Никандрова В.М., Исхакова Р.Л. Сокращение механизмов реакций при моделировании высокотемпературных течений в соплах // Труды МАИ. 2019. № 105. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=104166>

7. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Никандрова М.В., Гасилин В.В. Генерация сокращенных реакционных механизмов для гетерогенных течений в соплах // Труды МАИ. 2020. № 112. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=116335>. DOI: [10.34759/trd-2020-112-6](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-6)

8. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С. Численное моделирование сжигания топлива в стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе // Труды МАИ. 2019. № 109. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=111353>. DOI: [10.34759/trd-2019-109-6](https://doi.org/10.34759/trd-2019-109-6).

Труды МАИ. 2021. Выпуск № 120

Trudy MAI. 2021. Issues no.120

9. Погосбемян М.Ю., Сергиевская А.Л., Крупнов А.А. Сравнительное моделирование процесса диссоциации молекул N_2 в термически неравновесных условиях // Труды МАИ. 2018. № 102. URL:

<http://trudymai.ru/published.php?ID=98822>

10. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе // Труды МАИ. 2015. № 83. URL:

<http://trudymai.ru/published.php?ID=61826>

11. Зельдович Я.Б., Компанеев А.С. Теория детонации. – М.: ГИТТЛ, 1955. – 268 с.

12. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. – М.: Научный мир, 2002. С. 64-71 с.

13. 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>

14. Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 929 с.

15. Гиббс Д.В. Термодинамика, статистическая механика. – М.: Наука, 1982. 584 с.

16. Белов Г.В. Термодинамика. – М.: Юрайт, 2016. -248 с.

17. Глушко В.П., Алемасов В.Е. и др. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. – М.: ВИНТИ, 1971. Т.3. -350 с

18. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т. – М.: Наука, 1982. Т. 1. Кн. 1.

– 495 с.

19. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. – М: Металлургия, 1994. С. 45 – 47.
20. Зыонг Минь Дык, Гидаспов В.Ю. Вычислительный алгоритм расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированной фазы // Труды МАИ. 2012. № 112. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=116331>. DOI: [10.34759/trd-2020-112-4](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-4)
21. Meilanov R.P., Magomedov R.A. Thermodynamics in fractional calculus // Journal of Engineering physics and thermophysics, 2014, vol. 87, no. 6, pp. 1521 – 2531. DOI: [10.1007/s10891-014-1158-2](https://doi.org/10.1007/s10891-014-1158-2)
22. Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев К.Г. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов: монография. – М.: Наука, 1982. – 260 с.

References

1. Bulat P.V., Denisenko P.V., Volkov K.N. *Nauchno-tekhnicheskii vestnik informatsionnykh tekhnologii, mekhaniki i optiki*, 2016, vol. 16, no. 1, DOI: [10.17586/2226-1494-2016-16-1-1-21](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2016-16-1-1-21)
2. Aleksandrov V.Yu., Aref'ev K.Yu., Baskakov A.A., Il'chenko M.A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Mashinostroenie*, 2017, no. 2(683), pp. 98-108.
3. Gidasпов V.Yu. *Trudy MAI*, 2013, no. 66. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=40233>

4. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2011, no. 49. URL: http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3
5. Gidaspov V.Yu., Severina N.S. *Nekotorye zadachi fizicheskoi gazovoi dinamiki* (Some problems of physical gas dynamics), Moscow, Izd-vo MAI, 2016, 195p.
6. Kryukov B.G., Abdullin A.L., Nikandrova V.M., Iskhakova R.L. *Trudy MAI*, 2019, no. 105. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=104166>
7. Kryukov V.G., Abdullin A.L., Nikandrova M.V., Gasilin V.V. *Trudy MAI*, 2020, no. 112. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=116335>. DOI: [10.34759/trd-2020-112-6](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-6)
8. Gidaspov V.Yu., Kononov D.S. *Trudy MAI*, 2019, no. 109. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=111353>. DOI: [10.34759/trd-2019-109-6](https://doi.org/10.34759/trd-2019-109-6)
9. Pogosbekyan M.Yu., Sergievskaya A.L., Krupnov A.A. *Trudy MAI*, 2018, no. 102. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=98822>
10. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2015, no. 83. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=61826>
11. Zel'dovich Ya.B., Kompaneets A.S. *Teoriya detonatsii* (Detonation theory), Moscow, GITTL, 1955, 268 p.
12. Belov G.V. *Termodinamicheskoe modelirovanie: metody, algoritmy, programmy* (Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs), Moscow, Nauchnyi mir, 2002, pp. 64 – 71 p.
13. Nazyrova R.R. *Trudy MAI*, 2017, no. 92. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=76946>

14. Girshfel'der D., Kertiss Ch., Berd R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostej* (Molecular theory of gases and liquids), Moscow, Izdatel'stvo inostrannoi literatury, 1961, 929 p.
15. Gibbs D.V. *Termodinamika, statisticheskaya mekhanika* (Thermodynamics, statistical mechanics), Moscow, Nauka, 1982, 584 p.
16. Belov G.V. *Termodinamika* (Thermodynamics), Moscow, Yurait, 2016, 248 p.
17. Glushko V.P., Alemasov V.E. et al. *Termodinamicheskie i teplofizicheskie svoistva produktov sgoraniya* (Thermodynamic and thermophysical properties of combustion products), Moscow, VINITI, 1971, vol. 3, 350 p.
18. Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. et al. *Termodinamicheskie svoistva individual'nykh veshchestv* (Thermodynamic properties of individual substances), Moscow, Nauka, 1982, vol. 1, book 1, 495 p.
19. Vatolin N.A., Moiseev G.K., Trusov B.G. *Termodinamicheskoe modelirovanie v vysokotemperaturnykh neorganicheskikh sistemakh* (Thermodynamic modeling in high-temperature neorganic systems), Moscow, Metallurgiya, 1994, pp. 45 – 47.
20. Zyong Min' Dyk, Gidasov V.Yu. *Trudy MAI*, 2012, no. 112. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=116331>. DOI: [10.34759/trd-2020-112-4](https://doi.org/10.34759/trd-2020-112-4)
21. Meilanov R.P., Magomedov R.A. Thermodynamics in fractional calculus, *Journal of Engineering physics and thermophysics*, 2014, vol. 87, no. 6, pp. 1521 – 2531. DOI: [10.1007/s10891-014-1158-2](https://doi.org/10.1007/s10891-014-1158-2)
22. Sinyarev G.B., Vatolin N.A., Trusov B.G., Moiseev K.G. *Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov: monografiya* (The use of

Труды МАИ. 2021. Выпуск № 120

Trudy MAI. 2021. Issues no.120

computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes: monograph),

Moscow, Nauka, 1982, 260 p.

Статья поступила в редакцию 29.09.2021; одобрена после рецензирования 06.10.2021; принята к публикации 22.10.2021.

The article was submitted 29.09.2021; approved after reviewing 06.10.2021; accepted for publication 22.10.2021.