

МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(национальный исследовательский университет)

На правах рукописи



Москаленко Ольга Александровна

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ
ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ СМЕСЕЙ В КАНАЛАХ**

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент.

В.Ю. Гидаспов

Москва – 2016

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
ГЛАВА 1. КЛАССИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.....	8
ГЛАВА 2. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ. 15	
2.1 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ	15
2.2 МОДЕЛЬ ТЕРМОДИНАМИКИ И ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ	23
2.3 МОДЕЛЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ И ТЕПЛОМАССОБМЕНА ИСПАРЯЮЩЕЙСЯ ЧАСТИЦЫ И КОЭФФИЦИЕНТОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА.....	26
2.4 ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ	32
ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В ГАЗОВЫХ И ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ СМЕСЯХ.....	39
3.1 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КАПЕЛЬ ВОДЫ НА ПАРАМЕТРЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В ГОРЮЧИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ	39
3.1.1 Смесь водорода с кислородом	39
3.1.2 Смесь водорода с воздухом	46
3.1.3 Смесь метана с воздухом	61
3.2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАНОЛО-ВОЗДУШНОЙ ГАЗОКАПЕЛЬНОЙ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ	72
3.3 ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 3.....	83
ГЛАВА 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ В КЕРОСИНО-ВОЗДУШНОЙ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ.....	84
4.1. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ (МЕТОДИКА ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ).....	85
4.2. ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ	100
4.3 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН ДЕТОНАЦИИ И ДЕФЛАГРАЦИИ В ГАЗОКАПЕЛЬНОЙ КЕРОСИНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ.....	102
4.4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ КЕРОСИНА В ВОЗДУХЕ В МОДЕЛЬНОЙ УДАРНОЙ ТРУБЕ.....	109
4.5 ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 4.....	112
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	115
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	117

Введение

Актуальность темы

Систематическое экспериментальное и теоретическое изучение детонации началось в конце 19 века. С пятидесятих годов 20 века активно развивается теория многомерной детонации газовых, газокапельных и газодисперсных смесей. Большой научный и практический интерес к изучению высокоскоростного горения и детонации газокапельных горючих смесей связан, как с необходимостью создания систем взрывобезопасности, направленных на подавление детонации (при взрывах на угольных шахтах, в промышленности при образовании реагирующих пылей, в двигателях внутреннего сгорания, на атомных станциях и др.), так и с желанием научиться управлять детонационным горением при создании перспективных технологических и энергетических установок (установки детонационно-газового напыления, объемные взрывы, прямоточные воздушно реактивные двигатели, перспективные двигатели, использующие энергию нестационарных и стационарных детонационных волн).

В настоящее время в России и за рубежом проводятся интенсивные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования высокоскоростного горения и детонации газовых, газокапельных и газодисперсных смесей. Результаты подобных работ представлены в авторитетных журналах, на большом числе международных симпозиумов, конференций и семинаров, отражены в ряде монографий. В связи с бурным развитием в последние 30 лет вычислительной техники, численное моделирование, как альтернатива и дополнение к экспериментальным исследованиям, стало необходимым этапом научных исследований и конструкторских разработок. Причем, в тех случаях, когда используются хорошо апробированные математические модели и вычислительные алгоритмы, дополнительная информация, получаемая с

помощью численного моделирования, не уступает по надежности экспериментальным данным и превосходит последние по своей полноте.

Необходимо отметить, что задача моделирования высокоскоростного горения и детонации газокапельных смесей в полном объеме, до сих пор не может быть решена с помощью широко используемых импортных и отечественных универсальных пакетов прикладных программ. Поэтому крайне важно создание отечественного научного задела, включающего многомасштабные физико-математические модели, оригинальные вычислительные алгоритмы и комплексы программ для моделирования детонации газокапельных смесей.

Целью диссертационной работы является разработка физико-математической модели, вычислительных алгоритмов и комплекса программ для моделирования волн детонации и дефлаграции в газокапельных смесях в каналах.

Научная новизна

1. Предложена уточненная универсальная физико-математическая модель, описывающая высокоскоростные течения многокомпонентного газа и капель жидкости, для случая равновесных и неравновесных, описываемых многостадийными кинетическими механизмами, химических превращений в газовой фазе, в которых участвуют, как вещества, входящие в состав газа, так и продукты испарения капель.

2. Предложен эффективный вычислительный алгоритм совместного решения одномерных уравнений физической газовой динамики, сопротивления и тепломассообмена капель жидкости с многокомпонентным газом, при наличии газофазных химических превращений, описываемых многостадийными кинетическими механизмами.

3. Решена задача о стационарной детонационной волне и стационарной волне дефлаграции в канале в многокомпонентной газовой среде, химические превращения в которой описываются многостадийными кинетическими механизмами, а капли могут испаряться. Рассчитаны равновесные адиабаты и

структура волн детонации в горючих газовых смесях (водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух) с добавлением капель воды и горючих газокапельных смесях метанола и керосина с воздухом.

4. Получены коэффициенты, входящие в аппроксимационные формулы температурной части потенциала Гиббса для жидкого и газообразного состояния углеводородных горючих сложного состава (бензина, керосина и дизельного топлива), моделируемого в рамках модели однокомпонентной жидкости.

5. Расчетным путем получена нестационарная картина инициирования детонации в газокапельной керосино-воздушной смеси падающей ударной волной.

Практическая ценность работы состоит в том, что разработанные вычислительные алгоритмы и комплекс программ могут использоваться для экспресс-анализа реагирующих многофазных течений в энергетических и технологических установках (в которых реализуются высокоскоростные течения, в том числе с детонацией или дефлаграцией), а также в качестве элемента в составе комплексов программ многомерного моделирования. Предложенные в диссертации методики математического моделирования позволяют рассчитывать для газовых и газокапельных топлив произвольного состава скорости волн детонации и дефлаграции, а также состав продуктов сгорания, температуру давление и др., в том числе и в режиме Чепмена-Жуге; при наличии кинетического механизма, определять задержку воспламенения, тонкую структуру волн, вплоть до выхода системы на равновесное состояние.

Достоверность и обоснованность результатов, представленных в диссертационной работе, обеспечивается строгостью математических постановок, разработкой адекватных физико-математических моделей, устойчивостью и сходимостью используемых численных методов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также сравнением результатов численного моделирования с результатами экспериментальных и расчетно-теоретических исследований других авторов.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности

В диссертации проведено исследование детонационных волн в газокапельных средах, разработаны вычислительные алгоритмы и программы моделирования многофазных реагирующих сред (области исследования 6, 8 специальности 01.02.05).

Структура диссертации

Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 232 наименований.

В гл. 1 представлен обзор литературы по теме диссертации.

В гл. 2 представлена физико-математическая модель газокапельных течений при наличии испарения и газофазных химических реакций, описаны использованные в работе численные методы и вычислительные алгоритмы.

В гл.3 исследовано влияние капель воды на параметры и структуру стационарной детонационной волны в горючих смесях: водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух и детонация метанола-воздушной газокапельной горючей смеси.

В гл. 4 рассмотрена задача численного моделирования стационарных волн горения и детонации и нестационарной детонационной волны в керосино-воздушной горючей смеси.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Апробация работы

Результаты диссертационной работы докладывались в период с 2006 по 2014 гг. на научных семинарах по физической газовой динамике, руководителем которых был У.Г.Пирумов, а также на XV, XVIII и XIX Международных конференциях по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (2007-2015 гг.); на VII, IX, X, XI Международных конференциях по неравновесным процессам в соплах и струях (2008-2016 гг.); на II и VII Международных научно-практических конференциях Воскресенского

филиала негосударственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Российский Новый Университет» (2013 -2015 г.г.).

Личный вклад автора

Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке вычислительных программ, проведении расчетов, их обработке и анализе, а также подготовке статей и докладов на конференциях. Соискателем реализованы используемые численные методы решения задачи, проведены вычислительные эксперименты и выполнен анализ полученных расчетных данных. Все положения диссертации, выносимые на защиту, получены соискателем самостоятельно.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в 15 работах, включая 3 статьи [3,8,15], входящие в перечень ВАК, и в 12 тезисах докладов на тематических конференциях[1,2,4-7,9-14].

Глава 1. Классические представления и обзор литературы

«Во многих имеющих практическое значение устройствах, начиная от нефтяных печей и кончая ракетными двигателями, используется горение жидких (иногда твердых) частиц, взвешенных в газе» [16,стр.330]. «Газовзвеси или аэровзвеси - смеси газа с твердыми частицами или жидкими каплями; иногда смеси газа с жидкими каплями называют аэрозолями» [17, стр. 15]. Основным направлением исследования течений газовзвесей являются процессы происходящие в них. К таким процессам относятся воспламенение, горение и детонация [18–25].

В настоящее время существует большое количество литературы, посвященной исследованию различных гетерогенных сред в том числе и газовзвесей. Так, например, ударные волны в газовзвесах рассмотрены в работах [17,26–28], горение и детонация –в работах [16–19, 26–27, 29–39]. Основы теории горения газокпельных смесей были заложены в работах [16, 26, 40–45]. В дальнейшем эта теория была рассмотрена в работах [46–59]. Химические реакции, протекающие в газовой фазе, играют важную роль при горении газовзвесей, так как в большинстве случаев сгорание топлива происходит в газофазном режиме.

Для описания горения веществ используются детальные кинетические механизмы. Они наиболее полно учитывают химические превращения в газовой фазе в широком диапазоне начальных и граничных условий. Такие детальные механизмы могут состоять из сотен веществ и тысяч элементарных стадий. Есть кинетические механизмы для описания превращений в топливных смесях, где в качестве горючего рассматриваются как простые вещества [60, 61], так и более сложные [62–72]. Использование неэмпирических детальных кинетических механизмов важно для полного и точного описания процессов, но приходится решать уравнения сохранения для каждого компонента. Поэтому химические реакции часто аппроксимируют простейшими моделями, которые содержат

небольшое число частиц и процессов, и имеющими полуэмпирический или эмпирический характер. В настоящее время создаются сокращенные кинетические механизмы [73,74] и при моделировании процесса горения используются «брутто-реакции» [75–78]. Упрощенные схемы описывают реагирующую систему при помощи небольшого числа компонентов. Но необходимо помнить, что такие упрощенные механизмы дают надежный результат только в определенных условиях [79]. В работе [80] отмечается, что «в ИХФ РАН в течение ряда лет разрабатывались глобальные кинетические механизмы горения, использующие экспериментальные данные по распространению ламинарных пламен [81–84] и диффузионных пламен на встречных струях [85]. Эти механизмы оказались полезными при моделировании турбулентного горения предварительно перемешанных [86] и неперемешанных [87] газов, а также самовоспламенения и горения капель и капельных газовзвесей [88–90]. Получаемые при их использовании расчетные результаты удовлетворительно согласуются с опытными данными».

Так, например, в статье [91] приведена процедура упрощения кинетических механизмов, которая основывается на комбинации неэмпирических алгоритмов упрощения механизмов (DRG, CSP и анализа чувствительности (DSA)). Также было приведено сравнение механизмов, полученных при помощи разработанной процедуры и механизмов, полученных методом экспертного анализа. Так механизм горения суррогата керосина был уменьшен с 71 вещества и 417 реакций до 47 веществ и 92 реакций. А механизм газификации углеводородов с 177 веществ и 879 обратимых реакций до 83 веществ и 278 реакций. В последнее время предложены методы уменьшения вычислительной сложности задач [92–94]. Например, берется детальный кинетический механизм и из него исключаются несущественные вещества и реакции в конкретных условиях. Когда дальнейшее упрощение невозможно, применяется другой подход, с помощью которого генерируется глобальный механизм, состоящий из небольшого числа брутто реакций, скорости которых рассчитываются на основе элементарных реакций

[95]. Для каждого метода упрощения существуют параметры, которые определяют степень упрощения механизма [92, 96, 97].

Также для расчетов необходимо знать термодинамические свойства индивидуальных компонентов. Они подробно описаны в работах [98–101].

«Моделирование газофазных реагирующих течений основано на общепринятой системе нестационарных связанных уравнений в частных производных, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии. Эти связанные уравнения описывают конвективное движение жидкости, химические реакции между основными компонентами и процессы диффузионного переноса, такие, как теплопроводность, вязкость и диффузию» [18, стр.28]. Для решения систем нестационарных, нелинейных, взаимосвязанных дифференциальных уравнений в частных производных были разработаны несколько методов, такие как «глобально- неявный метод, называемый также блочно-неявным методом, и метод дробных шагов, называемый также методом расщепления шага по времени. Другие общие методы расчета взаимодействий, такие, как метод прямых и метод конечных элементов, также применяются в этом случае.... Эти подходы часто комбинируются в «гибридные» алгоритмы, в которых разные методы используются для расчета различных взаимодействий» [18, стр.155–156]. Нестационарная теория самовоспламенения капли изучалась в работе А. Г. Мержанова [102]. Для замыкания моделей течений газокапельных смесей используются модели, описывающие сопротивление и тепломассообмен одиночной капли в газовом потоке. Чаще всего используется простая полуэмпирическая модель квазистационарного испарения однокомпонентной капли. [19,20,103-106].

Основоположником теории испарения капель в газообразной среде был Максвелл. Он рассмотрел простейший случай стационарного испарения сферической капли, неподвижной по отношению к газу. При соблюдении некоторых условий испарение можно считать квазистационарным [104]. В работах [107–113] рассматривается моделирование процесса испарения капель.

Теория квазистационарного диффузионного горения капли жидкого топлива создана Г. А. Варшавским [66] и рассмотрена [16, 68]. Эта теория хорошо подтверждается опытами, но в некоторых случаях [114] процесс диффузионного горения капли не может быть рассмотрен как квазистационарный [115–118].

Для описания сопротивления и тепломассообмена капли с газом необходимо знать коэффициенты переноса, то есть коэффициенты вязкости, теплопроводности газа и диффузии паров вещества капли в газе. Для их вычисления применяются формулы, с использованием параметров потенциалов Леннарда-Джонса или Штокмайера [18,101,119].

Существует два режима распространения волны горения в горючих газовых смесях: медленное горение (дефлаграция) и сверхзвуковая волна детонации. «Волна дефлаграции распространяется за счет диффузии тепла и (или) свободных радикалов из зоны реакции в свежую смесь перед фронтом, так что ее скорость много меньше скорости звука и давление практически постоянное. Другой, сверхзвуковой, механизм распространения волны горения связан с ударными волнами. В волне детонации газ сжимается и нагревается сильной ведущей ударной волной, поджигающей газовую смесь» [120, стр.772–773]. Исследования, проведенные в [121–125], процессов, протекающих при детонации в распылах жидкого топлива, свидетельствуют об их сложности. При этом основное внимание авторов уделяется детонационной способности смесей различного состава, условиям инициирования, распространения и продолжительности детонационного процесса. Данные исследований, проведенных в замкнутом (ограниченном) объеме в работах [126, 127], свидетельствуют о прямой зависимости процесса детонации от содержания паровой фазы топлива в двухфазной смеси. Методы и результаты исследования детонационных волн рассматриваются в работах Солоухина [128]. Войцеховский [129] открыл интересное явление, которое называется спиновая детонация. Далее это явление было изучено в [130, 131]. Моделирование детонационной волны изучалось в [132–156].

Известно, что инициирование детонации в топливо-воздушных смесях происходит как путем прямого инициирования импульсным источником энергии так и переходом горения в детонацию. При прямом инициировании в смеси создаётся мощная ударная волна, которая вызывает химическую реакцию в ударно-сжатой смеси. Выделяющаяся энергия в свою очередь подпитывает ведущую ударную волну. Если выделение энергии источника больше критического значения, в смеси образуется детонационная волна, в противном случае, детонация не возникает. Спонтанное возникновение детонации в топливо-воздушных смесях, как правило, происходит при переходе горения в детонацию. В исследованиях [157–166] изучались процессы перехода горения в детонацию (ПГД). В течении ряда последних лет, ПГД исследовался в многочисленных работах, в том числе с применением численного моделирования [167–172]. Было установлено, что детонационная волна формируется между фронтом горения и ведущей ударной волной.

«Переход от горения к детонации представляет фундаментальный интерес как спонтанный переход между двумя стационарными решениями полной системы уравнений газовой динамики. Выяснение физических процессов определяющих переход горения в детонацию (ПГД) важно как для понимания способов предотвращения детонации в связи с проблемой безопасности АЭС, для хранения водорода и для водородных двигателей [173,174], так и инициирования детонации для разработки импульсно - детонационных двигателей [175]... Несмотря на многолетние экспериментальные и теоретические исследования, физический механизм ПГД до сих пор неясен и рассматривается как одна из наиболее важных нерешенных проблем в теории горения» [120, стр. 773].

В исследованиях Я. Б. Зельдовича было впервые указано, что существует механизм, инициирующий спонтанное возникновение детонации. Это так называемый градиентный механизм, объясняющий переход горения в детонацию [176]. Какие процессы приводят к включению градиентного механизма и как образуется градиент температуры до сих пор не изучено. Источниками взрывных

процессов могут являться ряд неоднородностей, о чем свидетельствуют данные теоретических исследований механизма инициирования детонации [177–180]. Исследования характеристик взрывов в различных средах приведены в [181–184].

Исследование воспламенения и горения паров углеводородных топлив в воздухе представляет большой практический и фундаментальный интерес [185–194]. Задержка воспламенения является важнейшим параметром, характеризующим реакционную способность смеси. Существует достаточно большое количество экспериментальных работ по испарению и самовоспламенению капель углеводородных горючих [52,195–200]. Вопросы горения топлив в современных двигательных установках рассмотрены в работах [201-203].

Исследованию свойств керосина посвящены работы [204–211]. В работе [208] авторами предложена математическая модель, описывающая воспламенение и горение пара керосина в воздухе, справедливая в области недостатка окислителя: $\varphi \in [0.7,1]$. Используя разработанную физико-математическую модель, описана структура детонационной волны в стехиометрической смеси в режимах Чепмена - Жуге и пересжатом. В работе [206] показана возможность использования модельного горючего при моделировании состава и параметров состояния газа, образующегося в результате равновесного сгорания авиационного керосина в воздухе. Таким горючим может быть смесь равных количеств метана и ацетилена. В работе [212] проанализирован процесс прогрева капель от начальной температуры до равновесной температуры испарения. Определено время прогрева капли и проанализирована зависимость времени прогрева от температуры и размеров капли жидкости. Получены формулы для вычисления скорости испарения капель различных жидкостей. В статье [168] показана возможность перехода горения в детонацию в непрерывном потоке воздушной смеси частично предиспаренного авиационного керосина ТС-1 при атмосферном давлении. Кинетический механизм окисления парафиновых углеводородов до н-гексадекана $C_{16}H_{34}$ был предложен в работе [213]. В настоящее время [214] создана база

данных для характеристик ламинарного горения смесей суррогата JP-8 (аналога отечественного ТС-1) с воздухом в широком диапазоне изменения начальной температуры, давления и состава смеси.

Из сделанного обзора следует, что в настоящее время в связи с развитием вычислительной техники и технологии крайне важны работы над созданием замкнутых комплексных физико-математических и вычислительных моделей, описывающих физико-химические процессы в газочапельных горючих средах от инициирования до завершения (установления равновесия), это и является основной задачей диссертационной работы.

При моделировании высокоскоростного горения необходимо ориентироваться на фундаментальные свойства взрывчатых смесей, такие как набор параметров течения, характеризующих состояния Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции, которые являются функцией исключительно термодинамических свойств исходных компонент и продуктов их сгорания.

Модели процессов (испарение и химическая кинетика) должны обеспечивать в модельных задачах непрерывный переход системы в состояние Чепмена-Жуге и количественно правильно описывать процесс перехода.

Описания свойств веществ и физико-химических процессов должны обеспечивать непрерывный переход рассматриваемой системы в состояние термодинамического равновесия, что автоматически обеспечит энергетический баланс в системе.

Используемые вычислительные модели и алгоритмы должны обеспечивать строгое выполнение законов сохранения и начал термодинамики.

Глава 2. Физико-математическая модель и численные методы

2.1 Математическая модель

В энергетических установках, основу рабочего процесса которых составляют газокапельные течения, протекают разнообразные физико-химические превращения. Химические компоненты газовой фазы и вещества, входящие в состав частиц, участвуют в химических реакциях, происходят обмен массой, тепловое и механическое взаимодействие частиц с газовой фазой, вещество частиц, при этом, может испаряться и конденсироваться. В работе рассматривается случай умеренно крупных частиц, т.е. таких, размеры которых велики по сравнению со средней длиной свободного пробега молекул в газовой фазе, при условии, что суммарный объем соответствующих частиц мал по сравнению с объемом, занимаемым газом. Именно такие условия чаще всего реализуются в используемых в промышленности технологических и энергетических установках. В указанном случае процессы, происходящие в газовой фазе, можно рассматривать с использованием замыкания на гидродинамическом уровне. При этом, в первом приближении, в выражениях для гидродинамических потоков вещества, импульса и энергии можно пренебречь слагаемыми, описывающими диффузию, вязкость и теплопроводность, и ограничиться только слагаемыми, описывающими конвективный перенос. Вязкость, теплопроводность и диффузия могут, тем не менее, существенно влиять на процессы, происходящие в непосредственной окрестности поверхности частиц, поэтому их необходимо учитывать в слагаемых, описывающих взаимодействие несущей и дисперсной фаз друг с другом.

При сделанных выше предположениях течение двухфазной смеси в каналах с пологими стенками можно рассматривать в рамках квазиодномерного приближения. Уравнения, описывающие течение многокомпонентного

реагирующего газа в областях непрерывности течения, можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u F = M F; \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u F + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) F = I F + p \frac{\partial F}{\partial x}; \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right) F = E F; \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho F \gamma_i + \frac{\partial}{\partial x} \rho u F \gamma_i = W_i F, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.4)$$

Здесь M, I, E - слагаемые, учитывающие массообмен, тепловое и механическое взаимодействия газа с частицами, N - число газообразных компонентов в смеси, ρ, p, e, γ_i - плотность, давление, внутренняя энергия и мольно-массовые концентрации, F - площадь канала, W_i - число молей i -ого вещества, образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых переходов.

Уравнения (2.4) описывают кинетику газофазных химических реакций, выражения для W_i получаются по обычным правилам химической кинетики. Наряду с указанным выше иногда рассматривают еще два предельных случая протекания газофазных химических реакций - случай "замороженных" реакций, когда приближенно полагают:

$$W_i = 0, i = 1, \dots, N, \quad (2.5)$$

а γ_i находят из уравнений (2.4); и случай "равновесного" протекания реакций. В последнем случае полагают, что реакции протекают настолько быстро, что химическое равновесие в реагирующем газе успевает установиться в каждый текущий момент времени. В условиях химического равновесия концентрации химических компонентов удовлетворяют уравнениям материального баланса и условию:

$$W_i(p, T, \gamma) = 0, i = 1, \dots, N. \quad (2.6)$$

Учитывая сделанные выше предположения, в качестве базовой модели, описывающей течение полидисперсной диспергированной фазы, будем рассматривать следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s F = 0; \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F = -MF; \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s u_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s m_s u_s^2 F = -IF; \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) = -EF. \quad (2.10)$$

Здесь n_s, m_s, e_s, u_s - число частиц в единице объема, масса, внутренняя энергия, скорость частиц соответственно.

Системы уравнений, описывающие совместное течение газа и частиц, связаны через правые части, учитывающие взаимное влияние фаз. Соотношения для M, I, E фигурирующие в (2.1-2.4) и (2.7-2.10) имеют следующий вид:

$$M = -n_s \dot{m}_s; \quad (2.11)$$

$$I = -n_s (\dot{m}_s u_s + m_s \dot{u}); \quad (2.12)$$

$$E = -n_s \left(\dot{m}_s \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + m_s \left(\dot{e}_s + u_s \dot{u}_s \right) \right). \quad (2.13)$$

Здесь $\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{e}_s$ - выражения, описывающие скорость изменения скорости, массы и внутренней энергии капли [3, 8, 215–221].

Хорошо известно, что наряду с областями плавного изменения параметров двухфазного потока, в поле течения могут существовать сравнительно тонкие зоны резкого изменения параметров газа, которые обычно аппроксимируют поверхностями разрыва [215]. Примерами таких зон могут служить слой смешения газов, состоящих из различных молекул (контактный разрыв), ударные волны и, с некоторыми оговорками, детонационные волны. В условиях моделирования технологических процессов толщина

указанных ударно - волновых и диссипативных образований мала по сравнению с характерным размером задачи - длиной канала. Поэтому, в первом приближении, можно пренебречь их тонкой структурой, т.е. отслеживать только полные перепады параметров и их эволюцию во времени. При этом соответствующие перепады должны удовлетворять соотношениям, получаемым в предположении бесконечной малости толщин указанных зон из условий равенства нулю перепадов потоков вещества, импульса и энергии, т.е. их непрерывности. В случае, когда характерное расстояние изменения параметров частиц λ_s велико по сравнению с толщиной ударной волны λ_{yg} :

$$\lambda_{yg} \ll \lambda_s = |D - u_s| \tau_s, \tau_s = \max\left(\frac{\dot{e}_s}{e_s}, \frac{\dot{u}_s}{u_s}, \frac{\dot{m}_s}{m_s}\right)^{-1}, \quad (2.14)$$

(τ_s - характерное время существенного изменения параметров диспергированной фазы, D - скорость УВ) соотношения на разрыве имеют вид:

$$[\rho(D - u)] = 0; \quad (2.15)$$

$$[P + \rho(D - u)^2] = 0; \quad (2.16)$$

$$[(D - u)\left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{(D - u)^2}{2}\right)] = 0; \quad (2.17)$$

$$[u_s] = 0, [e_s] = 0, [m_s] = 0. \quad (2.18)$$

Квадратные скобки означают разность между значениями, заключенных в них, комплексов, перед- и за- разрывом, т.е. они являются непрерывными на разрывах.

Слой смешения (контактный разрыв) характеризуется дополнительным соотношением:

$$[D - U] = 0. \quad (2.19)$$

Из (2.15) - (2.18) следует, что на контактном разрыве:

$$[U] = 0, [P] = 0. \quad (2.20)$$

В случае ударной волны соотношения (2.15) - (2.18) дополняются условиями непрерывности концентраций компонентов:

$$[\gamma_i] = 0, i = 1, \dots, N. \quad (2.21)$$

Условия (2.21) справедливы, если для концентраций химических компонентов выполняется критерий аналогичный (2.14).

На граничных траекториях частиц, отделяющих зону, занятую чистым газом от газокапельной смеси, параметры, характеризующие газовую фазу непрерывны, а число частиц в единице объема n_s , терпит разрыв (равно нулю в точке со стороны чистого газа).

Для замыкания системы уравнений используют термические и калорические уравнения состояния, вид которых определяется используемой моделью термодинамических свойств веществ:

$$e = e(P, T, \gamma); \quad (2.22)$$

$$\rho = \rho(P, T, \gamma); \quad (2.23)$$

$$e_s = e_s(P, T, \gamma); \quad (2.24)$$

$$\rho_s = \rho_s(P, T, \gamma). \quad (2.25)$$

При рассмотрении течения за УВ введем автономную координату: $\xi = Dt - x$ (расстояние от ударной волны до рассматриваемой точки x , t – время) (рис. 2.1a), $v = D - u$, $v_s = D - u_s$ – скорость газа и частиц относительно УВ, а индексом “0” обозначить параметры перед УВ. Тогда из системы уравнений (2.1) - (2.10) можно получить следующую систему дифференциально - алгебраических уравнений:

$$\rho v + n_s m_s v_s = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}; \quad (2.26)$$

$$\rho v + p + n_s m_s v_s^2 = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2; \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \rho v \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) + n_s m_s v_s \left(e_s + \frac{v_s^2}{2} \right) = \\ = \rho_0 v_0 \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right); \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0}; \quad (2.29)$$

$$\frac{d\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} = W_i, \quad i = 1, \dots, N; \quad (2.30)$$

$$v_s \frac{dm_s}{d\xi} = \dot{m}_s = W_s \mu_s / n_s; \quad (2.31)$$

$$v_s \frac{du_s}{d\xi} = \dot{u}_s; \quad (2.32)$$

$$v_s \frac{dm_s h_s}{d\xi} = \dot{H}_s, \quad (2.33)$$

где h_s, γ_{is} - энтальпия, число молей i -ого вещества в килограмме массы частицы, соответственно; \dot{H}_s - выражение, описывающее скорость изменения энтальпии.

Начальные условия для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2.30-2.33) задаются непосредственно за ударной волной. При переходе через ударную волну остаются неизменными масса, скорость и температура частиц, а также состав газовой смеси.

$$\gamma_i(0) = \gamma_{i1} = \gamma_{i0}, m_s(0) = m_1 = m_{i0}, u_s(0) = u_{s1} = u_{s0}, H_s(0) = H_{s1} = H_{s0}. \quad (2.34)$$

При решении системы (2.26)-(2.33) предполагается, что двухфазная смесь перед ударной волной находится в состоянии скоростного и температурного равновесия: $u_{v0} = u_{i0} = u_0, W_i \approx 0, \dot{u}_s = 0, \dot{m}_s \approx 0, \dot{H}_s = 0$. (2.35)

Также необходимо отметить, что в случае впрыска частиц (рис. 2.1б) $\xi \equiv x, v \equiv u, v_s \equiv u_s$, индексом "0" обозначены параметры в сечении впрыска, которые (идентичны (2.34)) являются начальными условиями, для (2.26-2.33), при этом условия (2.35) могут не выполняться.

Для замыкания системы (2.26-2.34) используются модели термодинамики, химической кинетики, сопротивления и тепломассообмена, которые будут описаны ниже [3, 41, 215, 218, 219].

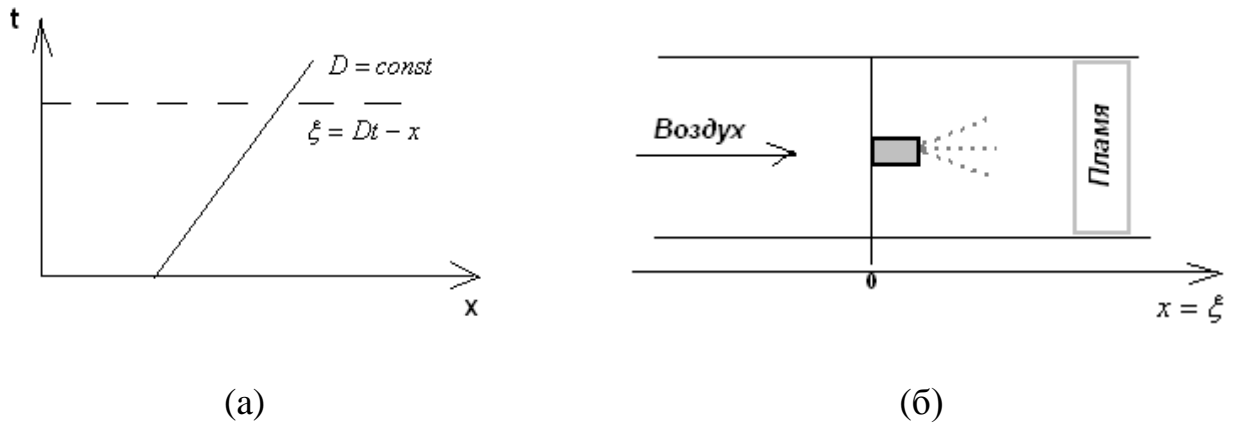


Рис.2.1. (а) Стационарная ударная волна; (б) Случай впрыска частиц

Система уравнений (2.26)-(2.34) содержит стационарную точку, которой соответствует равенство нулю правых частей (2.30-2.34). В рассматриваемом случае возможны чисто “газофазная” -

$$W_i(V, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad \text{и} \quad m_s = 0,$$

и двухфазная -

$$W_i(V, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad m_s \neq 0, \quad \dot{m}_s = 0, \quad \dot{u}_s = 0, \quad \dot{H}_s = 0,$$

стационарные точки.

Из системы (2.26-2.34) может быть получено дифференциальное уравнение для скорости:

$$\rho a^2 \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) (M^2 - 1) dv = \rho v \sum_{i=1}^N \left(h_{\gamma_i} - \frac{h_T}{p_T} p_{\gamma_i} \right) d\gamma_i +$$

$$n_s v_s \left[h_s + \frac{v_s^2}{2} - h - \frac{v^2}{2} + a^2 \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) + \frac{\rho v h_T}{p_T} (v - v_s) \right] dm_s - ,$$

$$n_s v_s m_s \left[v \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) + (v - v_s) \right] du_s + n_s v_s m_s dh_s$$

Здесь $a^2 = p_\rho \frac{\rho h_T - \rho h_\rho}{\rho h_T - 1}$, $M = \frac{v}{a}$, a – скорость звука, нижние индексы “ T ”, “ ρ ”, “ γ_i ”

– означают частное дифференцирование по соответствующему параметру. Из

термодинамики следует, что $\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 > 0$. Записанное дифференциальное уравнение

для относительной скорости содержит особенность в случае, когда в процессе решения $M^2 - 1 = 0$, а правая часть уравнения не равна нулю, в этом случае система (2.26-2.34) решения не имеет. Точка Чепмена-Жуге, соответствует одновременному выполнению равенства $M^2 - 1 = 0$ и достижения состояния равновесия (стационарной точки системы).

Рассмотрим случай, когда в начальный момент времени скорости газа и капель и газа совпадают ($v_0 = v_{s0}$), и в процессе эволюции системы капли полностью испаряются. Тогда параметры в стационарной точке могут быть найдены из решения системы нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned} \rho v &= \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}; \\ \rho v^2 + p &= \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2; \\ \rho v \left(h + \frac{v^2}{2} \right) &= \rho_0 v_0 \left(h_0 + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right); \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.37)$$

Обозначим через: $\rho^0 = \rho_0 + n_{s0} m_{s0}$, $h^0 = \frac{\rho_0 h_0 + n_{s0} m_{s0} e_{s0}}{\rho_0 + n_{s0} m_{s0}}$, тогда система примет

вид:

$$\begin{aligned} \rho v &= \rho^0 v_0; \\ \rho v^2 + p &= \rho^0 v_0^2 + p_0; \\ h + \frac{v^2}{2} &= h^0 + \frac{v_0^2}{2}; \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Эквивалентными преобразованиями система (2.38) приводится к виду:

$$p - p_0 + \frac{v_0^2}{V_0^2} (V - V_0) = 0; \quad (2.39)$$

$$e - e^0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(V - V_0) = 0; \quad (2.40)$$

$$\gamma_i = \gamma_i(V, T, \gamma_1^0, \dots, \gamma_{N_e}^0) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.41)$$

Для смеси совершенных газов:

$$e = \sum_{i=1}^N \gamma_i e_i^0(T), \quad p = \frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \gamma_i, \quad (2.42)$$

$$\gamma_k^0 = \sum_{i=1}^N A_k^i \left(\gamma_i^0 + \frac{n_s^0 m_s^0}{\rho_0} \gamma_{is} \right), \quad k = 1, 2, \dots, N_e.$$

Выражение (2.39) задает на плоскости p - V , так называемую, прямую Михельсона, обозначающую линейную связь между давлением и удельным объемом, (2.40) - (2.42) - равновесную детонационную и дефлаграционную адиабату. Решение (2.39) - (2.42) задает множество достижимых (стационарных) точек системы (2.26) - (2.34), при сделанных выше предположениях, в зависимости от начальной скорости v_0 .

2.2 Модель термодинамики и химической кинетики

В рассматриваемом случае, газовая смесь представляет из себя смесь совершенных газов, термодинамические свойства которой описываются заданием потенциала Гиббса [98], вида :

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(p \gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)], \quad (2.43)$$

где $R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ - универсальная газовая постоянная, $P_0 = 101325 \text{ Па}$ - стандартное давление, $G_i^0(T)$ - известные функции, стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонентов [98].

Потенциал Гиббса жидкости, считается зависящим от температуры и давления:

$$G_s(p, T) = \frac{1}{\mu_s} \left(G_s^0(T_s) + \frac{1}{\rho_s(T)} (p - P_0) \right). \quad (2.44)$$

Здесь μ_s , ρ_s - молекулярный вес, плотность жидкости, соответственно. Все остальные термодинамические параметры могут быть рассчитаны с использованием выражения для потенциала Гиббса и его частных производных. Например, связь между удельным объемом, давлением, температурой и концентрациями (уравнение состояния Менделеева-Клайперона), можно записать:

$$v = 1/\rho = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_T = \frac{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i}{p}. \quad (2.45)$$

Энтропия S :

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p = \sum_{i=1}^N \gamma_i (S_i^0(T) - R \ln(p \gamma_i / P_0 \sum_{(j)} \gamma_j)), \text{ где } S_i^0(T) = \left(\frac{\partial G_i^0(T)}{\partial T} \right)_p. \quad (2.46)$$

Энтальпия h :

$$h = G + TS = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \text{ где } H_i^0 = G_i^0 - T \left(\frac{\partial G_i^0}{\partial T} \right)_p. \quad (2.47)$$

Внутренняя энергия e :

$$e = G + TS - \frac{p}{\rho} = \sum_{i=1}^N \gamma_i E_i^0(T), \text{ где } E_i^0 = H_i^0 - RT. \quad (2.48)$$

Химический потенциал μ_i :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i} = RT \ln(p \gamma_i / P_0 \sum_{(j)} \gamma_j) + G_i^0(T). \quad (2.49)$$

Кинетический механизм газофазных реакций полагается многостадийным и состоящим из обратимых реакций [215].



здесь r - номера стадий, $\vec{v}_i^{(r)}$ - стехиометрические коэффициенты, M_i - символы молекул или атомов химических компонентов. Стехиометрические коэффициенты являются неотрицательными числами: целыми в случае реальных химических реакций, вещественными - в случае брутто реакций.

Выражения для W_i , отвечающие механизму (2.50), имеют следующий вид [215]:

$$W_i = \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}), \quad (2.51)$$

$$\vec{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)}(T) \exp \left[\sum_{(i)} \vec{v}_i^{(r)} \ln(\rho \gamma_i) \right]. \quad (2.52)$$

С целью согласования кинетики типа (2.50) - (2.52) с термодинамикой, описываемой потенциалом Гиббса вида (2.43), использовалась следующая связь между константами скоростей каждой пары взаимобратных реакций, образующих обратимые стадии (2.50) [215]:

$$\frac{\vec{K}^{(r)}(T)}{\vec{K}^{(r)}(T)} = \exp \left[\sum_{(i)} (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} + \ln \left(\frac{RT}{P_0} \right) \right) \right]. \quad (2.53)$$

Для аппроксимации температурной зависимости констант скоростей прямых реакций используется обобщенная формула Аррениуса (2.54) [222].

$$K(T) = A \exp \left(-\frac{E}{RT} + n \ln T \right). \quad (2.54)$$

Процесс испарения может быть описан “реакцией фазового перехода”:

$$M_S^L \Leftrightarrow M_S^V, \text{ соответственно } W_S = \dot{m}_s n_s / \mu_S.$$

В “равновесном” случае γ_i находятся из условий химического равновесия, которые могут быть записаны в параметрической форме (2.55) и уравнений сохранения элементного состава (2.56):

$$\mu_i(\rho, T, \vec{\gamma}) = \sum_{K=1}^{N_e} A_i^k z_K, \quad i=1,2,\dots,N, \quad (2.55)$$

$$\sum_{i=1}^N A_i^k \gamma_i = \gamma_k^0, \quad k=1,2,\dots,N_e, \quad (2.56)$$

здесь N_e - число элементов, N – количество рассматриваемых компонентов, γ_k^0 - мольно-массовые концентрации элементов - известные величины, определяемые по начальному составу, z_K - неизвестные параметры. Соотношения (2.55) - (2.56) задают концентрации, как неявно-заданные функции плотности, температуры и элементного состава:

$$\gamma_i = \gamma_i(\rho, T, \vec{\gamma}^0). \quad (2.57)$$

2.3 Модель сопротивления и тепломассообмена испаряющейся частицы и коэффициентов молекулярного переноса

Модели сопротивления и тепломассообмена испаряющейся частицы описывают зависимости $\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{H}_s$ от текущих значений параметров частиц и обтекающего их газа. Используются полуэмпирические критериальные зависимости, обобщенные [4] на случаи квазистационарных, континуальных режимов тепломассообмена и сопротивления одиночных, испаряющихся частиц, обтекаемых многокомпонентным газом [215].

Уравнение движения частицы под действием увлекающих ее вязких сил газа имеет вид:

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \rho_s \frac{du_s}{dt} = C_D \pi r^2 \rho \frac{(u-u_s)^2 (u-u_s)}{2|u-u_s|}, \quad (2.58)$$

$$\dot{u}_s = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_s d_s} C_D |u-u_s| (u-u_s), \quad (2.59)$$

здесь r - радиус частицы, d_s - диаметр частицы, ρ, ρ_s - соответственно плотность газа и вещества частицы, C_D - коэффициент лобового сопротивления. Числа Маха и Рейнольдса потока газа, движущегося относительно частиц определяются по формулам:

$$\text{Re} = \frac{d_s |u-u_s|}{\bar{\eta}}, \quad M = \frac{|u-u_s|}{a}, \quad \text{Pr} = \frac{\bar{\eta} \bar{C}_p \bar{\rho}}{\bar{\lambda}}, \quad Sc_i = \frac{\bar{\eta}}{\bar{D}_i}, \quad (2.60)$$

где a - местная скорость звука газа.

Для расчета коэффициента лобового сопротивления каплей C_D используется система соотношений Хендерсона [26], которая позволяет описать изменение коэффициента сопротивления в широком диапазоне чисел Маха и Рейнольдса.

Формула для расчета коэффициента сопротивления частицы имеет вид:

$$C_D = \begin{cases} C_D^1, & 0 \leq M \leq 1 \\ C_D^1(1, \text{Re}) + \frac{4}{3}(M-1)[C_D^2(1.75, \text{Re}) - C_D^1(1, \text{Re})], & 1 \leq M \leq 1.75. \\ C_D^2, & M > 1.75 \end{cases} \quad (2.61)$$

Здесь

$$C_D^1 = \frac{24}{\text{Re} + s \left[4.33 + \frac{3.65 - 1.53 T_1 / T}{1 + 0.353 T_1 / T} \exp\left(-\frac{0.247 \text{Re}}{s}\right) \right]} +$$

$$+ \left[\frac{4.5 + 0.38(0.03 \text{Re} + 0.48 \sqrt{\text{Re}})}{1 + 0.03 \text{Re} + 0.48 \sqrt{\text{Re}}} + 0.1 M^2 + 0.2 M^3 \right] \exp\left(\frac{-0.5 M}{\sqrt{\text{Re}}}\right) +$$

$$+ 0.6 s \left[1 - \exp\left(-\frac{M}{\text{Re}}\right) \right],$$

$$C_D^2 = \frac{0.9 + \frac{0.34}{M^2} + 1.86 \sqrt{\frac{M}{\text{Re}}} \left(2 + \frac{8}{\kappa M^2} + \frac{2.116}{\kappa M} \sqrt{\frac{T_l}{T}} - \frac{4}{\kappa^2 M^4} \right)}{1 + 1.86 \sqrt{\frac{M}{\text{Re}}}},$$

где $s = M \sqrt{0.5\kappa}$, а κ -показатель адиабаты, который, в случае химически реагирующих течений, рассчитывается как отношение теплоемкостей при постоянных давлении и удельном объеме, вычисленных при текущих значениях концентраций компонентов.

Выражение для потока вещества капли в реакции испарения (конденсации), в соответствии с [41], может быть записано в виде:

$$\dot{m}_s = -2\pi d \bar{D}_s \bar{\rho} \delta_m^0 \ln \left(\frac{1 - \rho_s / \rho}{1 - \rho_s^H / \rho} \right) = -2\pi d \bar{D}_s \bar{\rho} \delta_m^0 \ln \left(\frac{1 - \gamma_s \mu_s}{1 - \gamma_s^S \mu_s} \right), \quad (2.62)$$

здесь $\rho_s^H = p_s^H / \rho R T_s$, $p_s^H = p_s^H(T_s)$ - давление насыщенных паров i - ого вещества при температуре частицы, γ_s^S -массовая концентрация пара у поверхности капли, γ_s - массовая концентрация испаряющегося вещества в газовом потоке, $\delta_m^0 = 1 + 0.287 \text{ Re Sc} (\text{Re Sc}^{4/3} + 1,232)^{-1/2}$ и $\delta_T^0 = 1 + 0.287 \text{ Re Pr} (\text{Re Pr}^{4/3} + 1,232)^{-1/2}$, поправки на ненулевую скорость обтекания капель потоком газа.

Для потока тепла от газа к капле, может быть получено выражение [41]:

$$Q = \frac{\bar{C}_p \delta_T^0 \dot{m}_s (T - T_s) / \delta_m^0}{\frac{\bar{C}_p \dot{m}_s}{e^{2\pi d_s \delta_m^0 \bar{\lambda}} - 1}}, \quad (2.63)$$

где $\bar{\lambda}$ -коэффициент теплопроводности газа, \bar{C}_p , C_{ps} -соответственно удельные теплоемкости газа и пара.

Коэффициенты диффузии - \bar{D}_i , теплопроводности - $\bar{\lambda}$, теплоемкость - \bar{C}_p , плотность - $\bar{\rho}$, а также числа Рейнольдса (Re), Прандтля (Pr), Шмидта (Sc)

вычислялись по средним значениям в “тонком слое” вокруг капли (при $\gamma_i^b = \beta\gamma_i^s + (1-\beta)\gamma_i$; $T_b = \beta T_s + (1-\beta)T$, (2.64)

β - некоторый параметр из интервала $[0, 1]$, T, T_s - соответственно, температура газа и капли, γ_i^s - массовая концентрация i -го компонента у поверхности капли, γ_i - массовая концентрация i -го компонента в газовом потоке. γ_i^b, T_b - средние концентрации и температура в “тонком” слое.

Конкретное значение параметра β рекомендуется подбирать таким образом, чтобы достигалось соответствие между расчетами по предлагаемой модели и экспериментальными данными, характеризующими поведение капли в определенных условиях.

Тепло Q идет как на нагрев частицы, так и на испарение материала частицы, таким образом, при наличии химических реакций вида (2.50) уравнение для нахождения температуры частицы имеет вид:

$$\frac{dm_s h_s}{dt} = Q + \dot{m}_s h(T_s). \quad (2.65)$$

В случае отсутствия фазовых переходов внутри частицы данное уравнение может быть записано относительно температуры частицы:

$$m_s C_s \frac{dT_s}{dt} = Q + L_s \dot{m}_s, \quad (2.66)$$

где C_s, L_s -соответственно удельная теплоемкость и удельная теплота парообразования вещества капли, α -коэффициент теплопередачи.

Эффективный коэффициент диффузии паров вещества частиц в многокомпонентном газе D_k находился по формуле Уилки [18, 223]

$$D_k = \sum_{(i \neq k)} \gamma_i \left[\sum_{(i \neq k)} \gamma_i / D_{ik} \right]^{-1}, \quad (2.67)$$

$$D_{ik} = \frac{3}{16} \left[\frac{2}{\pi} (RT)^3 \frac{\mu_i + \mu_k}{\mu_i \mu_k} \right]^{1/2} [N_A p \sigma_{ik}^2 \Omega_{ik}^{(1,1)*}]^{-1}, \quad (2.68)$$

где $\Omega_{ik}^{(1,1)*}$, σ_{ik} - интеграл столкновений и эффективный диаметр соответственно, μ_i, μ_k - молекулярные массы.

Коэффициент вязкости рассчитывался по приближенной формуле Уилки [18, 222, 223], а коэффициент теплопроводности по формуле Массона и Саксена с использованием уточненной корреляции Эйкена [18, 222, 223]:

$$\eta = \sum_{(i)} \eta_i (\gamma_i / B_i), \quad B_i = \sum_{(j)} A_{ij} \gamma_j; \quad (2.69)$$

$$A_{ij} = [1 + (\eta_i / \eta_j)^{1/2} (\mu_j / \mu_i)^{1/4}]^2 [8(1 + \mu_i / \mu_j)]^{-1/2}; \quad (2.70)$$

$$\eta_i = \frac{5}{16} \left[\frac{\mu_i RT}{\pi} \right]^{1/2} [N_A \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}]^{-1}; \quad (2.71)$$

$$\lambda = \sum_{(i)} \frac{\eta_i}{\mu_i} (1,32 c_{pi} + 0,45 R) (\gamma_i / B_i), \quad (2.72)$$

где η - вязкость смеси газов, η_i - вязкость чистых компонентов.

Для вычисления интегралов столкновений Штокмайера применялась аппроксимация Брокау [223].

$$\Omega_{ik}^{(1,1)*} = \Omega_D(T_{ik}^*) + 0,19 \delta_{ik} / T_{ik}^*, \quad T_{ik}^* = RT / N_A \varepsilon_{ik}, \quad (2.73)$$

$$\Omega_i^{(2,2)*} = \Omega_V(T_i^*) + 0,2 \delta_i / T_i^*, \quad T_i^* = RT / N_A \varepsilon_i. \quad (2.74)$$

Здесь $\Omega_D(T_{ik}^*)$, $\Omega_V(T_i^*)$ - аналогичные интегралы для потенциала Леннарда-Джонса, значения которых вычислялись по их аргументам с использованием аналитических аппроксимаций [223]. Параметры потенциалов взаимодействия одинаковых молекул $\sigma_i, \varepsilon_i, \delta_i$ брались из справочника [223, 215].

Параметры потенциалов взаимодействия различных молекул σ_{ik} , ε_{ik} , δ_{ik} находят по правилам суперпозиции. В случае взаимодействия двух неполярных молекул [223]:

$$\sigma_{ik} = \frac{\sigma_i + \sigma_k}{2}, \quad \varepsilon_{ik} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_k}, \quad (2.75)$$

где σ_{ik} - диаметр сечения соударений, ε_{ik} - потенциал для молекул вида i и k .

Если хотя бы одна из двух взаимодействующих молекул является полярной, то используется правило суперпозиции Брокау [223]:

$$\sigma_{ik} = \sqrt{\sigma_i \sigma_k}, \quad \varepsilon_{ik} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_k}, \quad \delta_{ik} = \sqrt{\delta_i \delta_k} \quad (2.76)$$

Для расчета переносных свойств смесей используются параметры потенциала Леннарда-Джонса, которые собраны в результате анализа справочной литературы и приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Коэффициенты потенциала Леннарда-Джонса

Вещество	σ_i	ε_i	δ_i
O2	3.467	106.7	0
N2	3.798	71.4	0
H2O	2.52	775.0	1.0
CO	3.69	91.7	0
CO2	3.941	195.2	0
H2	2.827	59.7	0
NO	3.492	116.7	0
CH4	3.758	148.6	0
C2H6	4.443	215.7	0
C3H8	5.118	237.1	0
C8H18	6.620	488.0	0
O	2.631	295.6	0
N	2.495	419.0	0
H	2.120	505.4	0
OH	3.846	180.8	0
C	3.098	330.0	0
HO2	3.068	168.1	0
H2O2	4.196	289.3	0
NO2	3.765	210.0	0
HNO	2.898	171.4	0
C2H2	4.033	231.8	0
C2H4	4.163	224.7	0

Таблица 2.1 (продолжение)

Вещество	σ_i	ε_i	δ_i
CH ₃	3.644	312.0	0
HCO	3.465	187.4	0
H ₂ CO	3.758	312.0	0
CH ₂	3.502	476.0	0
C ₂ H	3.752	176.8	0
CH	3.360	640.0	0
CH ₃ OH	3.626	481.8	0
AR	3.542	93.3	0

2.4 Численные методы и вычислительные алгоритмы

Основной системой уравнений используемой в настоящей работе является система дифференциально-алгебраических уравнений (2.26-2.34). Для капли фиксированного состава: $\sum_{i=1}^N \gamma_{is} = \frac{1}{\mu_s}$, где μ_s - молекулярный вес вещества, из которого состоит капля. Последнее уравнение системы (2.33) может быть переписано относительно температуры капель.

$$v_s m_s C_{ps} \frac{dT_s}{d\xi} = \dot{H}_s - v_s h_s \dot{m}_s. \quad (2.77)$$

Преобразуем систему (2.26-2.29):

$$\begin{aligned} \rho v &= M = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0} - n_{s0} m_s v_{s0}; \\ \rho v^2 + p &= I = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2 - n_{s0} m_s v_{s0} v_s; \\ \rho v \left(h + \frac{v^2}{2} \right) &= E = \rho_0 v_0 \left(h_0 + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right) - n_{s0} m_s v_{s0} \left(e_s + \frac{v_s^2}{2} \right); \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0} = K;$$

$$h = \sum_{i=1}^N \gamma_i h_i^0(T), \quad p = \rho RT \sum_{i=1}^N \gamma_i. \quad (2.79)$$

Система нелинейных уравнений (2.78) решается итерационным методом при фиксированных значениях M , I , E . Будем считать, что давление и энтальпия

являются функциями удельного объема ($V = \frac{1}{\rho}$) и температуры - $h = h(V, T)$, $p = p(V, T)$. Исключим из системы уравнений (2.78) скорость $v = MV$, получим систему из двух нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} F_1(V, T) = M^2V + p(V, T) - I = 0 \\ F_2(V, T) = h(V, T) + M^2V^2 - \frac{E}{M} = 0 \end{cases} \quad (2.80)$$

Для решения системы (2.80) разработан вычислительный алгоритм, результатом работы которого являются значения V , T или код окончания, если решения не существует.

Введем вектор:

$$\vec{\eta} = \eta(\eta_1, \dots, \eta_N, \eta_{N+1}, \eta_{N+2}, \eta_{N+3}): \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} \eta_i &= \frac{\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{\rho v + n_s m_s v_s}, \quad i = 1, \dots, N; \\ \eta_{N+1} &= m_s; \\ \eta_{N+2} &= u_s; \\ \eta_{N+3} &= T_s. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Система уравнений химической кинетики и тепломассообмена в рассматриваемом случае может быть записана в виде:

$$\frac{d\eta_i}{dt} = \Omega_i(\zeta_1, \dots, \zeta_4, \eta_1, \dots, \eta_N), \quad \eta_i(t_0) = \eta_i^0, \quad i = 1, \dots, N+3. \quad (2.83)$$

Здесь $\vec{\zeta} = (u, V, T, n_s)$, при этом правая часть (2.83) может быть записана в релаксационном виде:

$$\Omega_i(\zeta_1, \dots, \zeta_4, \eta_1, \dots, \eta_N) = \varphi_i(\zeta_1, \dots, \zeta_4, \eta_1, \dots, \eta_N) - \phi_i(\zeta_1, \dots, \zeta_4, \eta_1, \dots, \eta_N).$$

Причем, ϕ_i прямо пропорциональна η_i : $\phi_i = \eta_i \tilde{\phi}_i$.

Скорость, удельный объем, температура газа, число частиц в единице объема, входящие в правую часть (2.83), являются неявно заданными функциями $K, M, I, E, \vec{\eta}$.

Для решения (2.83) используется полуявная двухточечная разностная аппроксимация, предложенная У. Г. Пирумовым [215]:

$$\eta_{i,n+1} - \eta_{i,n} = \tau \left[\sigma \Omega_{i,n} + (1-\sigma) \Omega_{i,n+1}(\vec{\zeta}_{n+1}, \vec{\eta}_{n+1}) \right], \quad i=1,2,\dots,N+3. \quad (2.84)$$

Здесь $\tau = t_{n+1} - t_n$ - шаг интегрирования; σ - параметр неявности ($0 \leq \sigma \leq 1$, в расчетах $\sigma = 0,4$).

Известными считаются значения параметров $\vec{\zeta}$ и $\vec{\eta}$ в моменты времени t_0, \dots, t_n , требуется найти параметры в момент времени t_{n+1} .

Система нелинейных алгебраических уравнений (2.84) решается двухшаговым методом до достижения некоторой наперед заданной точности. Обозначим приближение искомых величин, абсолютную и относительную невязки по уравнению (2.84) на k -ой итерации через $\eta_{i,n+1}^k$, $D_{i,n+1}^k$ и $\delta_{i,n+1}^k$ соответственно.

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_{i,n+1}^k = 1 - \frac{\eta_{i,n} + \tau \left[\sigma \Omega_{i,n} + (1-\sigma) \phi_{i,n+1}(\vec{\zeta}_{n+1}^k, \vec{\eta}_{n+1}^k) \right]}{\eta_{i,n+1}^k + \tau(1-\sigma) \phi_{i,n+1}(\vec{\zeta}_{n+1}^k, \vec{\eta}_{n+1}^k)}, \quad |\eta_{i,n}| > 10^{-12} \\ \delta_{i,n+1}^k = \eta_{i,n+1}^k - \frac{\eta_{i,n} + \tau \left[\sigma \Omega_{i,n} + (1-\sigma) \phi_{i,n+1}(\vec{\zeta}_{n+1}^k, \vec{\eta}_{n+1}^k) \right]}{1 + \tau(1-\sigma) \phi_{i,n+1}(\vec{\zeta}_{n+1}^k, \vec{\eta}_{n+1}^k)}, \quad |\eta_{i,n}| \leq 10^{-12} \end{array} \right., \quad (2.85)$$

Для задания начального приближения $\eta_{i,n+1}^0 - \eta_{i,n+1}^0$ может быть использована формула линейной экстраполяции по двум рассчитанным временным слоям:

$$\eta_{i,n+1}^0 = \eta_{i,n} + \alpha \frac{t_{n+1} - t_n}{t_n - t_{n-1}} (\eta_{i,n} - \eta_{i,n-1}), \quad (2.86)$$

параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0,1]$, чтобы выполнялось условие $\eta_{i,n+1} \geq 0$.

В качестве критерия точности на k -ой итерации будем использовать сумму квадратов невязок по уравнениям (2.85) δ_i^K (скалярное произведение векторов невязок):

$$(\vec{\delta}^K, \vec{\delta}^K) = \sum_{i=1}^{N+3} (\delta_i^K)^2. \quad (2.87)$$

Если выполняется условие $|\delta_i^K| < \varepsilon$, для всех $i: 1 \leq i \leq N+3$, то решение считается найденным (в реальных расчетах $\varepsilon \approx 10^{-5}$).

На промежуточном шаге вычислим $\eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}$ с использованием метода типа Ньютона в предположении, что $\varphi_{i,n+1}^k$ и $\tilde{\phi}_{i,n+1}^k$ не зависят от $\eta_{i,n+1}^k$.

$$\eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}} = \eta_{i,n+1}^k - \beta^k D_i^k, \quad (2.88)$$

$$\text{где } \beta^k = \frac{\alpha}{\max_{i=1, \dots, N} \left(1 + \tau(1-\sigma) \tilde{\phi}_{i,n+1}^k(\zeta_{n+1}^k, \eta_{n+1}^k) \right)}, \quad (2.89)$$

параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0,1]$, чтобы выполнялось условие $\eta_{i,n+1} \geq 0$. Далее пересчитываются $\zeta_{n+1}^{k+\frac{1}{2}}$ и правые части системы уравнений (2.83):

$$\varphi_{i,n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}(\zeta_{n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}, \eta_{n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}); \quad \phi_{i,n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}(\zeta_{n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}, \eta_{n+1}^{\rightarrow k+\frac{1}{2}}), \quad (2.90)$$

и вычисляется $\delta_i^{k+\frac{1}{2}}$ и $\left(\vec{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \vec{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right)$.

На окончательном шаге находим $\eta_{i,n+1}^{k+1}$, как линейную функцию $\eta_{i,n+1}^k$ и $\eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}$:

$$\eta_{i,n+1}^{k+1} = \eta_{i,n+1}^k + \alpha(\xi - 1)(\eta_{i,n+1}^k - \eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}), \quad (2.91)$$

$$\eta_{i,n+1}^{k+1} = \eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}} + \alpha\xi(\eta_{i,n+1}^k - \eta_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}). \quad (2.92)$$

Формула (2.91) используется, когда $(\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^k) < \left(\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right)$, (2.92) - в

противном случае.

Значение параметра ξ , входящего в формулы (2.91-2.92) - ξ_{MIN} выбирается из условия минимума скалярного произведения невязок на $k+1$ - ой итерации - $(\bar{\delta}^{k+1}, \bar{\delta}^{k+1})$, которое является квадратичной функцией ξ , если применить разложение невязки в ряд Тейлора в точке $\eta_{i,n}$ и отбросить члены второго порядка и выше:

$$\begin{aligned} \bar{\delta}^{k+1} &= \xi \bar{\delta}^k + (1-\xi) \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \\ (\bar{\delta}^{k+1}, \bar{\delta}^{k+1}) &= \xi^2 (\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^k) + (1-\xi)^2 \left(\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right) + 2\xi(1-\xi) \left(\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right), \\ \xi_{MIN} &= \frac{\left(\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} - \bar{\delta}^k \right)}{\left(\bar{\delta}^k - \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^k - \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right)}, \end{aligned} \quad (2.93)$$

параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0,1]$, чтобы выполнялось условие $\eta_{i,n+1} \geq 0$. После вычисления $\eta_{i,n+1}^{k+1}$ пересчитываются $\zeta_{n+1}^{\rightarrow k+1}$ и $W_{i,n+1}(\zeta_{n+1}^{\rightarrow k+1}, \eta_{n+1}^{\rightarrow k+1})$ и осуществляется контроль точности, если точность не достигнута, то вычисления по формулам (2.84) - (2.93) повторяются.

Число итераций, за которое достигается сходимость, может использоваться для изменения шага интегрирования. Если число итераций три и меньше, шаг интегрирования увеличивается. Если число итераций больше шести - шаг интегрирования уменьшается. Если за десять итераций точность не достигнута, то шаг считается завышенным, осуществляется уменьшение шага и вычисления проводятся заново.

Для объективного контроля точности решения системы (2.26 - 2.29), после получения решения, вычисляется невязка (2.94) на двух шагах интегрирования:

$$\delta_{i,n+1}^{n+1,n-1} = \eta_{i,n+1}^k - \eta_{i,n-1} - (t_{n+1} - t_{n-1})[\alpha\Omega_{i,n-1} + (1 - \sigma)\Omega_{i,n+1}], \quad i = 1, 2, \dots, N + 3, \quad (2.94)$$

Если $|\delta_i^{n+1,n-1}| < 3\varepsilon$ для всех $i = 1, 2, \dots, N + 3$, то шаг интегрирования соответствует решаемой задаче, если нет, то его необходимо уменьшить.

Предлагаемый алгоритм совместного решения уравнений химической кинетики и сопротивления и тепломассообмена капель с газом показал свою эффективность при решении большого числа разномасштабных задач.

Для расчета равновесной адиабаты был разработан вычислительный алгоритм, который заключается в решении уравнений (2.40)-(2.42) относительно температуры при заданном удельном объеме V на отрезках $[0, V_0]$ и $[V_0, \infty]$.

При этом находились значения V_{\min} и V_{\max} такие, что при $V < V_{\min}$ и $V > V_{\max}$ система (2.40) - (2.42) решения не имела. Для нахождения температуры решалось уравнение (2.95), полученное из (2.40) после подстановки уравнений состояния (2.42).

$$F(T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i e_i^0(T) - e^0 + \frac{1}{2} \left(\frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \gamma_i + p_0 \right) (V - V_0) = 0. \quad (2.95)$$

Для решения нелинейного алгебраического уравнения (2.95) применялся вариант метода Ньютона:

$$T^{k+1} = T^k - \alpha^k \frac{F(T^k)}{F'(T^k)};$$

$$F(T) = \sum_{i=1}^N \left(\gamma_i \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_V + e_i \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_V \right) + \frac{1}{2} \frac{R(V - V_0)}{V} \sum_{i=1}^N \left(\gamma_i + T \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_V \right). \quad (2.96)$$

Расчет велся до выполнения условия $|F(T^k)| < \varepsilon$. Равновесные концентрации γ_i и их производные, находились на каждой итерации из решения задачи о расчете равновесного состава при заданных удельном объеме и температуре.

После определения температуры, рассчитывались давление, равновесная и замороженная скорости звука, энтропия, относительная скорость потока:

$$v = V \sqrt{\frac{p - p_0}{V_0 - V}} \quad . \quad (2.97)$$

Точки, в которых $\frac{p - p_0}{V_0 - V} < 0$ физического смысла не имеют. Найдем выражение для производной $\frac{dp}{dV}$ вдоль равновесной адиабаты. Для этого запишем полный дифференциал от (2.40):

$$\left(e_p + \frac{1}{2}(V - V_0) \right) dp + \left(e_v + \frac{1}{2}(p + p_0) \right) dV = 0, \text{ тогда}$$

$$\frac{dp}{dV} = - \frac{\left(e_v + \frac{1}{2}(p + p_0) \right)}{\left(e_p + \frac{1}{2}(V - V_0) \right)}. \quad (2.98)$$

В точке касания прямой Михельсона равновесной адиабате должно выполняться условие:

$$-\frac{v^2}{V^2} = - \frac{\left(e_v + \frac{1}{2}(p + p_0) \right)}{\left(e_p + \frac{1}{2}(V - V_0) \right)}.$$

С использованием (2.39) и первого из соотношений (2.38), получим:

$$e_v + \frac{1}{2}(p + p_0) = \frac{v^2}{V^2} \left(e_p - \frac{1}{2} \frac{V^2}{v^2} (p - p_0) \right).$$

Таким образом, в точке касания, относительная скорость смеси равна равновесной скорости звука:

$$v = \pm V \sqrt{\frac{e_v + p}{e_p}} = \pm a. \quad (2.99)$$

При больших углах наклона прямой Михельсона решение у системы (2.39)-(2.42) отсутствует.

Глава 3. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях

Жидкие частицы используются как в системах пожаротушения для подавления горения и детонации горючих смесей, так и в качестве горючего, испаряющегося в газофазную окислительную среду. В настоящей главе описываются результаты применения единого подхода описания газокапельных сред, основу которого составляют замкнутые модели термодинамических свойств веществ и химических превращений, набор которых определяет, какую роль горючего или окислителя в смеси играют многокомпонентный газ и жидкие частицы дисперсной фазы.

Приводятся результаты математического моделирования:

- детонации горючих газовых смесей, подача диспергированной воды в которые приводит к ослаблению и затуханию детонационных волн, рассмотрены смеси диспергированной воды и топлива: водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух;

- детонации газокапельных смесей, в которых горючим являются капли метанола, а окислителем, входящий в состав воздуха кислород.

3.1 Математическое моделирование влияния капель воды на параметры детонационных волн в горючих газовых смесях

3.1.1 Смесь водорода с кислородом

Для тестирования разработанных алгоритмов была решена задача об определении параметров детонации Чепмена-Жуге в газофазной горючей смеси водорода с кислородом при стандартных условиях, для моделирования

химических превращений использовалось 19 обратимых реакций (Таблица 3.1) [222]. Параметры детонации Чепмена-Жуге определялись из системы (2.26-2.34) методом “стрельбы” – подбиралась минимальная скорость детонационной волны D , при которой система (2.26-2.34) имеет решение с воспламенением горючей смеси. Система (2.26-2.34) решалась численно методом Пирумова [215].

Таблица 3.1 Реакции для смеси водорода с кислородом

Реакция										Коэффициенты ф-лы Аррениуса			
H	+	O2			<=>	O	+	OH		2.460E+08	0.00	6.473E+04	
O	+	H2			<=>	H	+	OH		15.0	2.00	3.158E+04	
OH	+	H2			<=>	H	+	H2O		6.30	2.00	1.239E+04	
O	+	H2O			<=>	OH	+	OH		3.980E+03	1.32	7.009E+04	
H2	+	M			<=>	H	+	H	+	M	2.900E+12	-1.00	4.365E+05
O	+	O	+	M	<=>	O2	+	M		6.170E+03	-0.50	0.00	
O	+	H	+	M	<=>	OH	+	M		4.200E+04	0.00	-1.163E+04	
H	+	OH	+	M	<=>	H2O	+	M		2.250E+10	-2.00	0.00	
H	+	O2	+	M	<=>	HO2	+	M		6.410E+06	-1.00	0.00	
HO2	+	H			<=>	H2	+	O2		6.630E+07	0.00	8.895E+03	
HO2	+	H			<=>	OH	+	OH		1.690E+08	0.00	3.657E+03	
HO2	+	O			<=>	OH	+	O2		6.300E+07	0.00	2.900E+03	
HO2	+	OH			<=>	H2O	+	O2		1.450E+10	-1.00	0.00	
HO2	+	HO2			<=>	H2O2	+	O2		2.000E+06	0.00	0.00	
H2O2	+	M			<=>	OH	+	OH	+	M	3.190E+11	0.00	1.971E+05
H2O2	+	H			<=>	H2O	+	OH		2.200E+09	0.00	4.907E+04	
H2O2	+	H			<=>	H2	+	HO2		4.820E+07	0.00	3.325E+04	
H2O2	+	O			<=>	OH	+	HO2		9.54	2.00	1.661E+04	
H2O2	+	OH			<=>	H2O	+	HO2		7.000E+06	0.00	5.983E+0	

На рис. 3.1 приводятся несколько итераций поиска решения методом “стрельбы”. Сплошной линией обозначена скорость горючей смеси относительно ударной волны ($D - u$), пунктирной - скорость звука a . Необходимо отметить, что координата, в которой достигается равенство: $D - u = a$ является особой точкой системы (2.26-2.34). Уравнения, входящие в систему (2.26-2.29) могут быть записаны в дифференциальной форме. Например, уравнение для относительной скорости имеет вид (раздел 2.1):

$$((D-u)^2 - a^2) \frac{d(D-u)}{d\xi} = \Phi(D-u, p, T, \gamma, m_l, u_l, e_l, n_l),$$

где Φ - сложная функция своих аргументов, которая стремится к нулю только при стремлении системы к состоянию равновесия. Поэтому, если существует точка ξ , в которой $(D-u)^2 - a^2 = 0$, то система (2.26-2.34) не имеет решения. Этому случаю соответствуют точки пересечения сплошных и пунктирных кривых. Режим детонации Чепмена-Жуге соответствует минимальной скорости D , при которой существует решение системы (2.26-2.34), при этом выполняется равенство скорости горючей смеси относительно ударной волны $(D-u)$ равновесной скорости звука [5, 6].

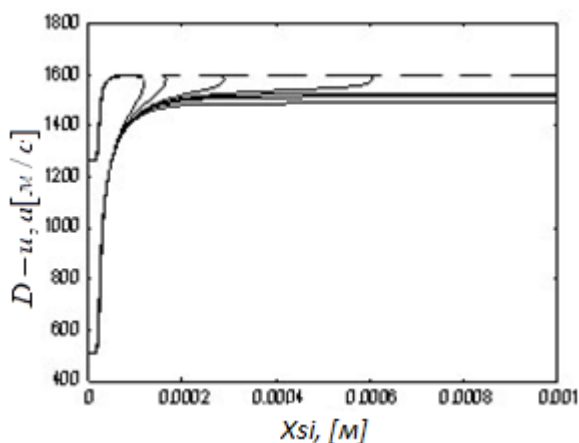


Рис. 3.1. Распределения скорости горючей смеси относительно ударной (сплошная кривая) и скорости звука (пунктирная кривая) в процессе итераций методом “стрельбы”. Стехиометрическая смесь водорода с кислородом ($u_0 = 0$, $p_0 = 101325 \text{ Па}$, $T_0 = 298.15 \text{ К}$)

На рис. 3.2 приводятся параметры детонации Чепмена-Жуге, найденные из численного решения системы (2.26-2.34) для стехиометрической смеси водорода с кислородом при нормальных условиях. Полученные результаты совпадают с непосредственным расчетом параметров детонации Чепмена-Жуге из (2.39 - 2.42) и условий химического равновесия с точностью до сотых долей процента.

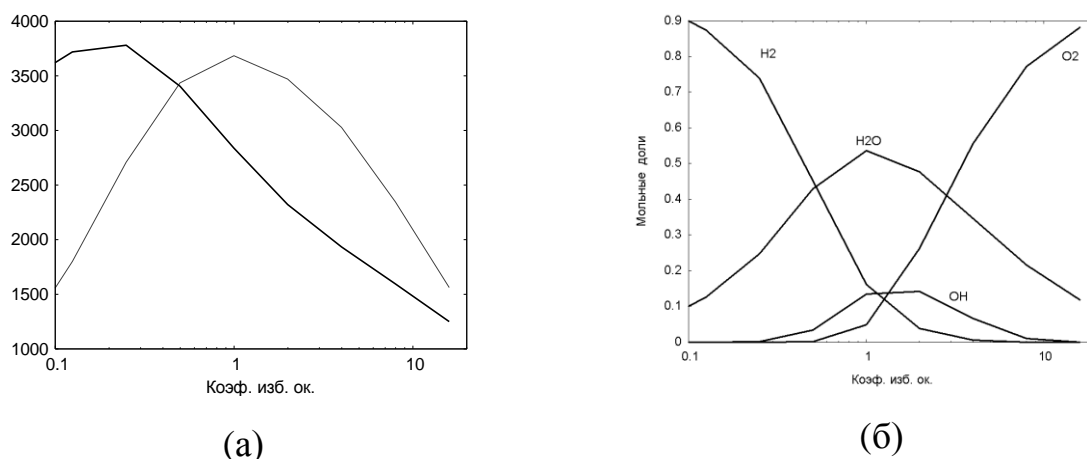


Рис. 3.2. Параметры в точке Чепмена-Жуге для смеси водород-кислород в зависимости от коэффициента избытка окислителя ($u_0 = 0$, $p_0 = 101325 \text{ Па}$, $T_0 = 298.15 \text{ К}$); (а) – скорость детонации (сплошная линия) и температура (пунктир), (б) – мольные доли компонентов

Было проведено численное исследование влияния капель воды на параметры стационарной детонации, разбавленной аргоном водородо-кислородной горючей смеси. Изучалось влияние начальной массовой доли и диаметра капель воды на структуру детонационной волны. Исследовалось поведение решения системы (2.26-2.34) при подходе к точке Чепмена-Жуге.

Рассмотрим характерное поведение решения системы (2.26-2.34) в зависимости от числа Маха $M = \frac{D-u_0}{a_0}$ ударной волны. Моделировалось течение горючей смеси $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ с добавлением капель воды диаметром 10 мкм в количестве равном массе газа. Решение системы (2.26-2.34) существует при $M \leq 3.2$, при $M = 3.4 - 5.0$ - система (2.26-2.34) решения не имеет и при $M \geq 5.2$ - решение существует (рис. 3.3а). Решение системы при $M \leq 3.2$, соответствует случаю установления двухфазного равновесия (рис. 3.3б, 3.3в). Масса капель воды при этом устанавливается равной 3.310^{-13} кг, что примерно соответствует 63% от начальной (рис. 3.3б), температура продуктов сгорания и капель воды сравниваются и равны 490 К (рис. 3.3в). Повышение температуры горючей смеси за фронтом ударной волны незначительное. Решение системы (2.26-2.34) при $M \geq 5.2$ соответствует случаю полного испарения капель воды (рис. 3.3б),

воспламенению горючей смеси за фронтом ударной волны, температура доходит до 3700 К, (рис. 3.3в), с последующим снижением температуры до равновесного значения 1950 К (рис. 3.3в).

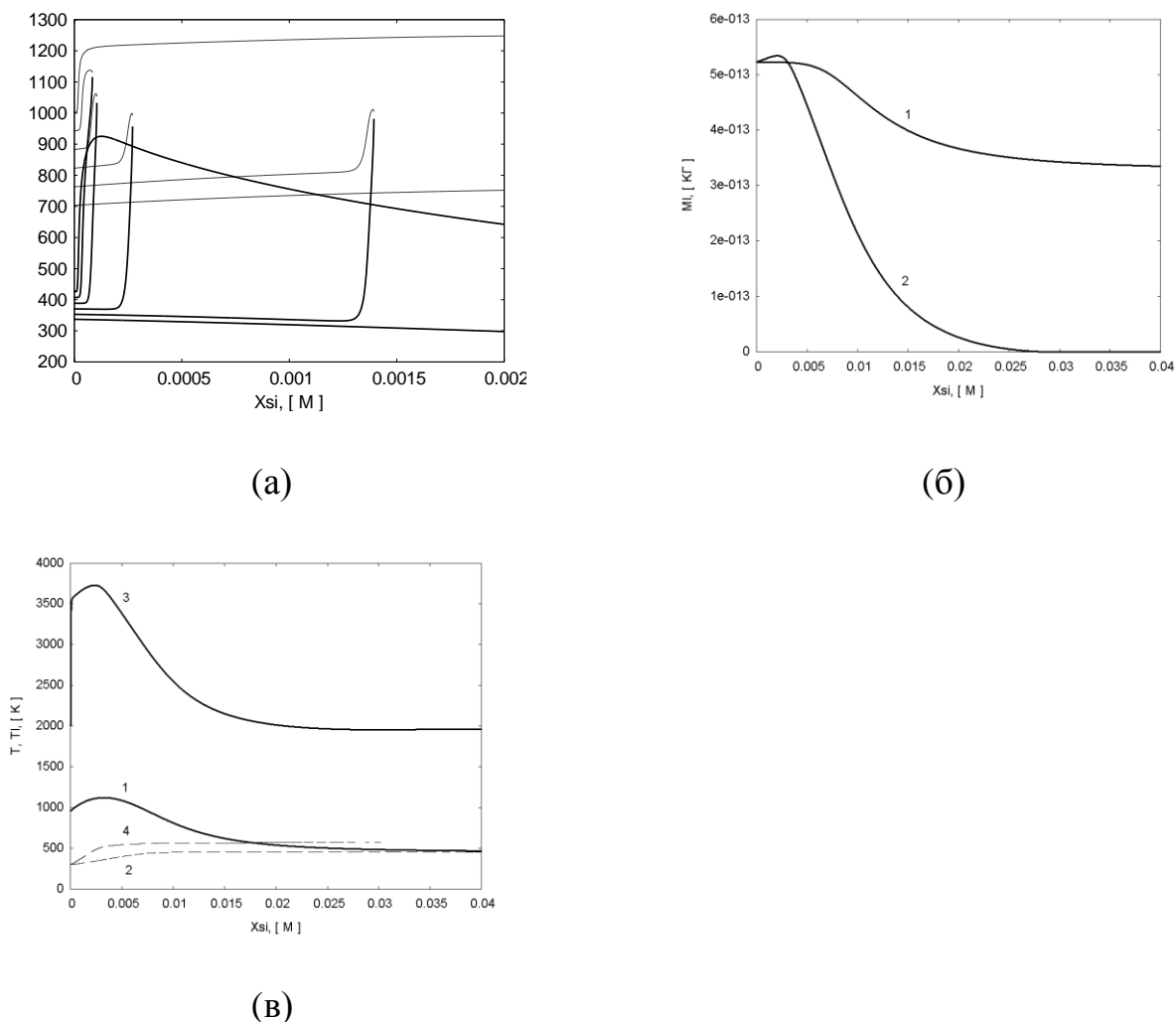
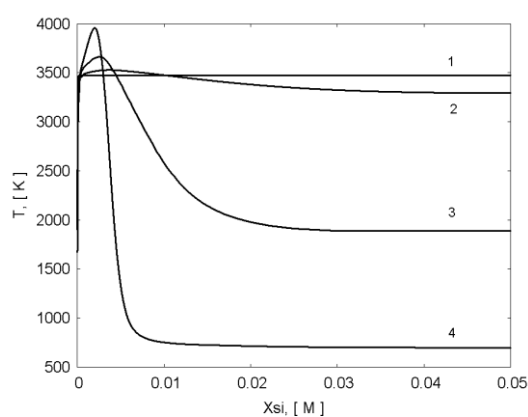


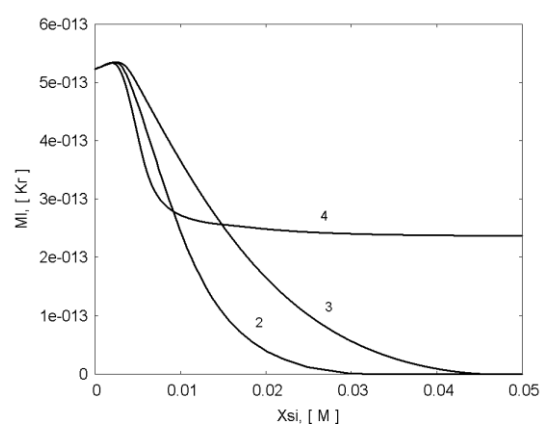
Рис. 3.3. Распределение параметров за УВ при различных числах Маха в смеси $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ + капли воды диаметром 10 мкм. Масса капель равна массе газа $u_0 = 0$, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К. (а) - относительная скорость газа (сплошная кривая) и скорость звука (пунктирная кривая) при числах Маха ударной волны 3.2, 3.6, 4.0, 4.4, 4.8, 5.2; (б) – масса одиночной капли 1 – $M=3.2$; 2 – $M=5.2$; (в) 1, 3 – температура газа; 2, 4 – температура капли; 1, 2 – $M=3.2$, 3, 4 – $M=5.2$

Необходимо отметить, что существует минимальная скорость УВ, при которой происходит воспламенение газок капельной смеси с полным испарением капель, для данной смеси она составляет 1997 м/с, что соответствует $M=5,02$.

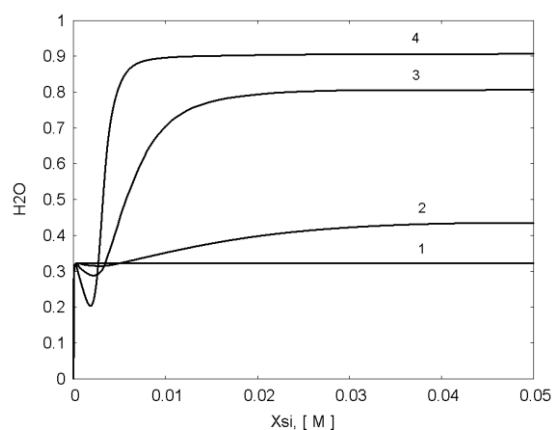
На рис. 3.4 приведены распределения параметров в стационарной ДВ минимальной скорости при различных соотношениях M_l / M_v . Из графиков в частности видно, что, не смотря на существенное уменьшение температуры, с увеличением массовой доли капель воды (рис. 3.4а), длина полного испарения капель меняется слабо (рис. 3.4б). Это связано с существенным возрастанием концентрации паров воды в потоке (рис. 3.4в). Кривые 4 на рис. 3.4 соответствуют случаю установления двухфазного равновесия.



(а)



(б)



(в)

Рис. 3.4. Распределение параметров в стационарной детонационной волне в смеси $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ + капли воды диаметром 10 мкм. ($u_0 = 0$, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К). (а) – температура газа; (б) – масса частицы воды; (в) – мольные доли H_2O , 1 – отношение массы воды к массе газа – 0, 2 – 0.1, 3 – 1, 4 – 5

Исследовалось влияние степени разбавления горючей смеси аргоном и отношения начальной массы капель воды к массе газа на значение минимальной

скорости ДВ. Расчеты показывают, что кинетика испарения и механизм химических превращений существенно влияют на значение минимальной скорости детонации. Минимальная скорость детонации газок капельной смеси совпадает со скоростью детонации Чепмена-Жуге при близкой к нулю массовой доле капель (рис. 3.5) и существенно отличается – при увеличении массовой доли капель (сплошные и пунктирные кривые, рис. 3.5).

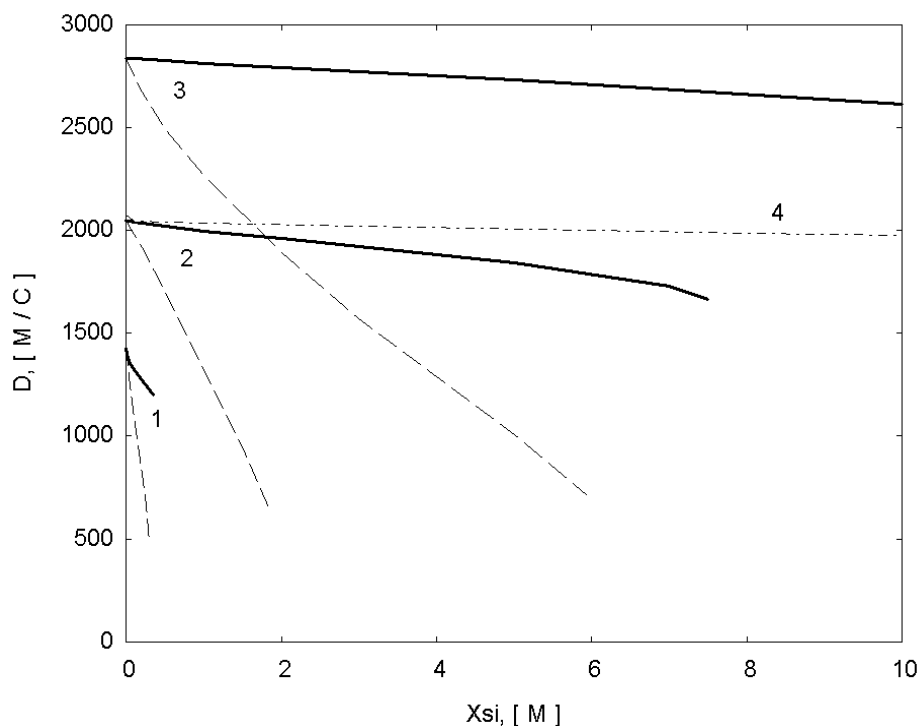


Рис. 3.5. Зависимость минимальной скорости ДВ от отношения массы жидкости к массе газа в исходной смеси. Двухфазный расчет (сплошная линия – капли диаметром 10 мкм, штрих-пунктир – 20 мкм); равновесный расчет – пунктир. 1 - $0.1H_2 + 0.05O_2 + 0.85Ar$; 2, 4 - $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$; 3 - $0.6H_2 + 0.3O_2 + 0.1Ar$

Пунктирные кривые на рис. 3.5 соответствуют скорости детонации Чепмена – Жуге, найденной из системы (2.39-2.42) при предположении о полном испарении капель воды и установлении состояния термодинамического равновесия. Точка окончания данных кривых соответствует равенству температуры за ДВ температуре перед ДВ. При малых значениях диаметров капель существует предельное значение массовой доли воды при которой существует минимальная скорость ДВ. Так для смеси $0.1H_2 + 0.05O_2 + 0.85Ar$ + капли воды 10 мкм максимальное отношение $M_l/M_v = 0.35$, для смеси

$0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ + капли воды диаметром 10 мкм $M_l/M_v = 7.5$. При диаметрах капель порядка 100 мкм минимальная скорость ДВ существует при всех рассмотренных значениях M_l/M_v от 0 до 20. Например, на рис. 3.5 сплошная кривая номер 2 соответствует каплям диаметром 10 мкм, а штрих-пунктирная кривая - 4 – каплям диаметром 20 мкм, минимальная скорость ДВ для капель большего диаметра выше, чем для меньшего, причем предельное значение M_l/M_v найти не удалось. Необходимо отметить, что данный факт крайне важен при построении систем подавления детонации. Минимальную скорость детонации можно рассматривать как предельную к которой стремится скорость нестационарной ДВ в газокапельной смеси, т.е. газодинамика процесса такова, что образовавшаяся в результате произвольного процесса пересжатая ДВ в канале, ослабевая, выходит на режим распространения с минимальной скоростью ДВ, после чего распространяется, не меняя своих параметров. Отсутствие минимальной скорости детонации свидетельствует о том, что ДВ будет ослабевать до тех пор, пока не перейдет в звуковую волну. Таким образом, впрыск капель воды малого диаметра в достаточном количестве приводит к затуханию ДВ в каналах, а большего диаметра - нет.

3.1.2 Смесь водорода с воздухом

Рассматривается стехиометрическая водородо-воздушная горючая смесь с добавлением капель воды в предположении, что капли воды полностью испарились и достигнуто состояние термодинамического равновесия. Продукты сгорания моделировались девятью компонентами: H_2 , OH , H_2O , O_2 , H_2O_2 , H_2O , N_2 , H , O . Изучалось влияние на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции отношения массы капель воды к массе водородо-воздушной смеси (m_{H_2O}/m_T) в начальном составе.

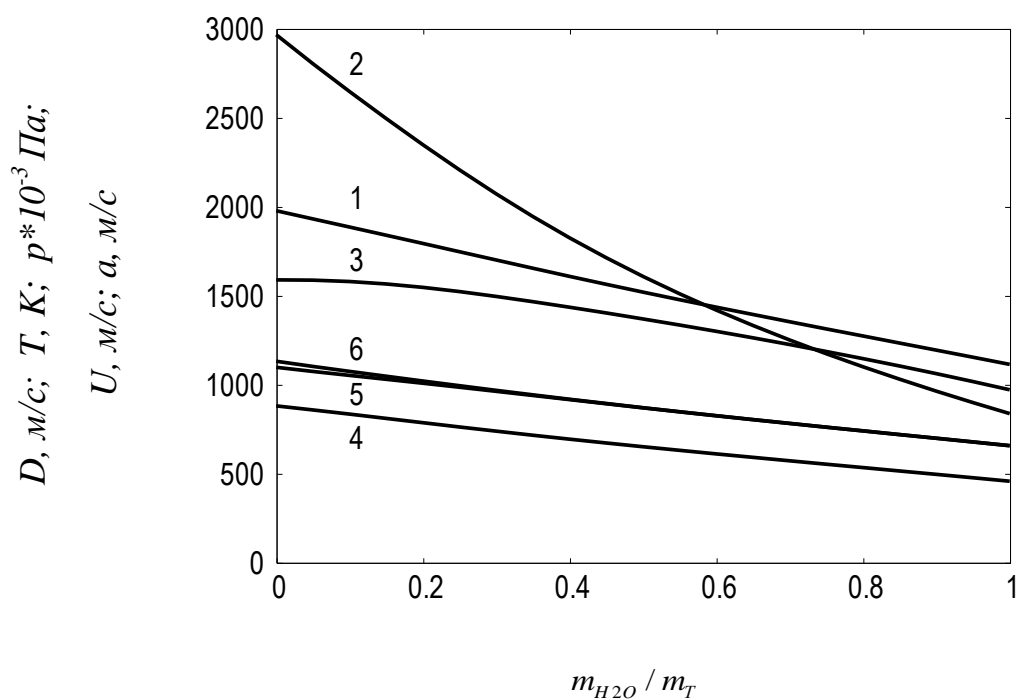


Рис. 3.6. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге в зависимости от отношения масс воды и газовой смеси (1 – Скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – температура, 3 – давление (*0.001), 4 – скорость потока, 5 – равновесная скорость звука, 6 – замороженная скорость звука)

Добавление капель воды приводит к уменьшению скорости детонации Чепмена-Жуге (кривая 1) и температуры (кривая 2). При равенстве масс воды и водородо-воздушной смеси температура продуктов сгорания в точке Чепмена-Жуге уменьшается более чем в 3 раза по сравнению с чисто газофазной горючей смесью. При $m_{H_2O} / m_T > 0.3$ продукты сгорания практически полностью состоят из паров воды и азота (рис. 3.7).

На рисунках 3.8 и 3.9 приведены аналогичные графики для точки Чепмена-Жуге дефлаграции. Скорость волны дефлаграции увеличивается с ростом m_{H_2O} / m_T (кривая 1, рис 3.8), температура в волне дефлаграции существенно ниже, чем в волне детонации при малом количестве впрыскиваемой воды.

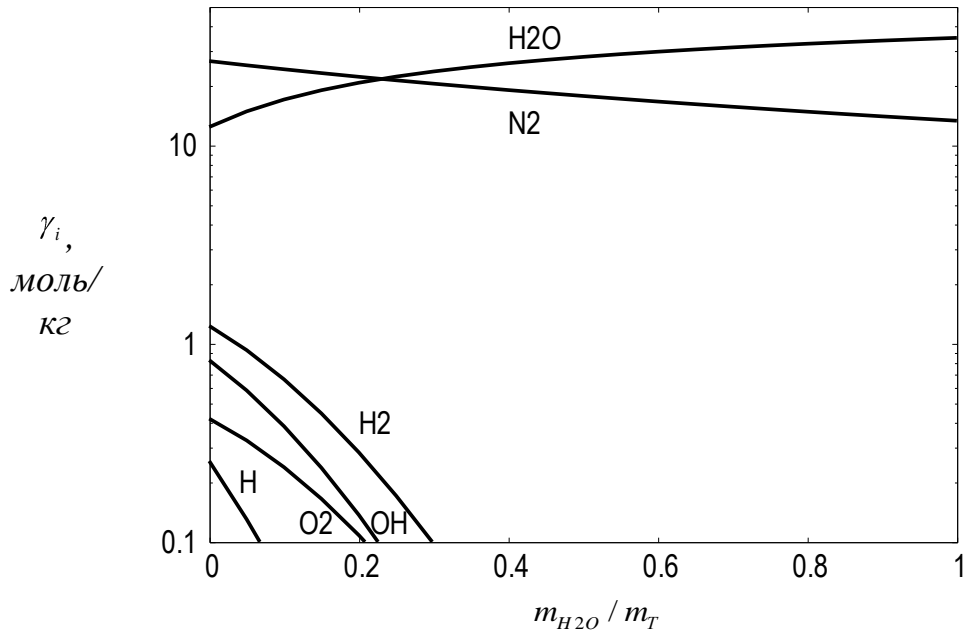


Рис. 3.7. Зависимость мольно-массовых концентраций компонентов в точке Чепмена-Жуге детонации в зависимости от отношения массы воды к воздуху

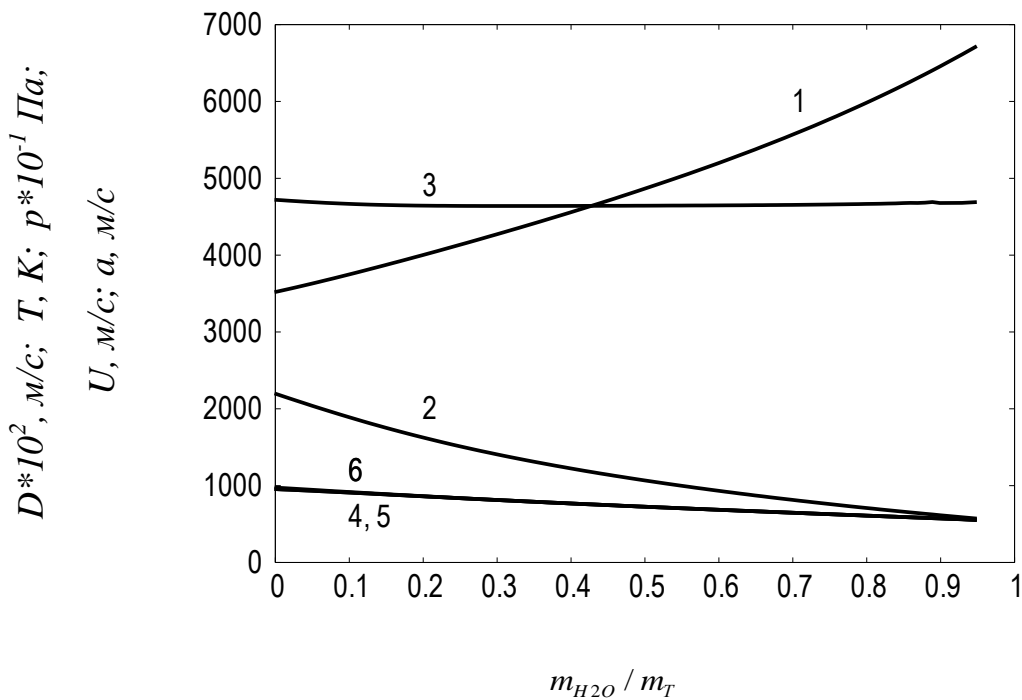


Рис. 3.8. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге дефлаграции в зависимости от отношения массы воды к воздуху (1 – Начальная скорость потока Чепмена-Жуге (*100), 2 – температура, 3 – давление (*0.1), 4 – скорость потока, 5 – равновесная скорость звука, 6 – замороженная скорость звука)

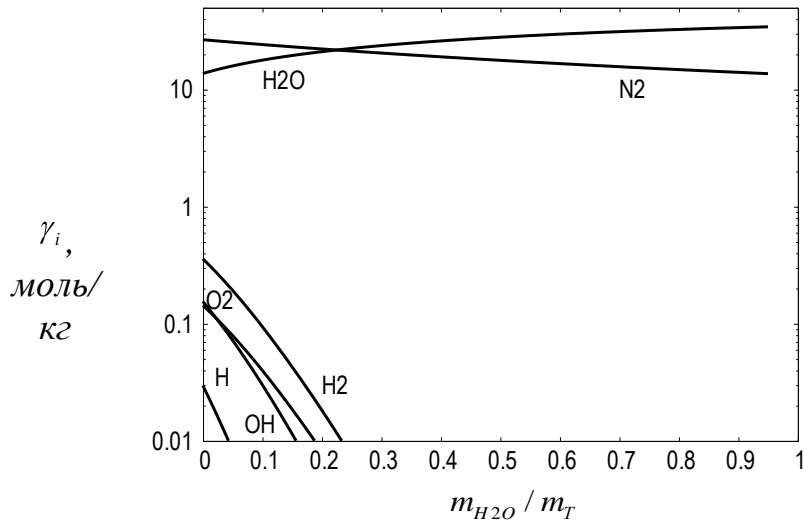


Рис. 3.9. Зависимость мольно-массовых концентраций компонентов в точке Чепмена-Жуге дефлаграции в зависимости от отношения массы воды к воздуху

Были рассчитаны равновесные адиабаты газофазных продуктов сгорания водородо-воздушной смеси с добавлением капель воды. На рисунках 3.10-3.12 представлены зависимости давления, температуры и концентрации паров воды, соответственно, вдоль равновесных адиабат.

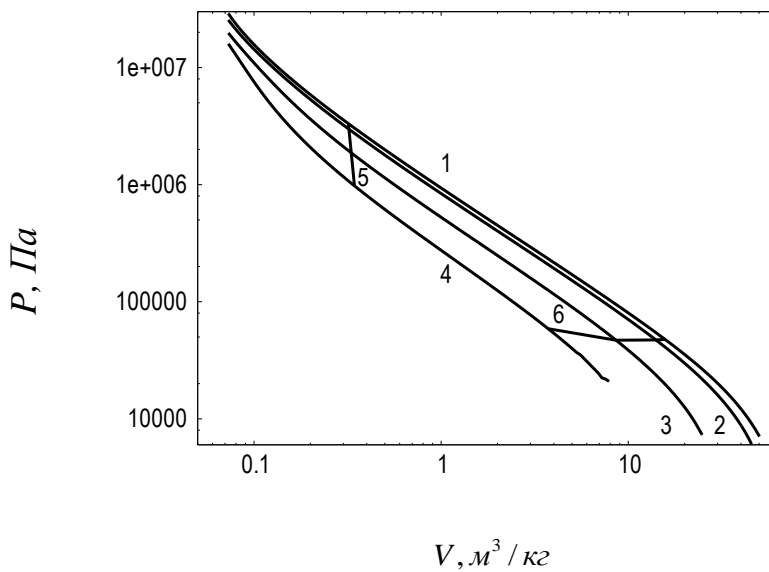


Рис. 3.10. Зависимость давления от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1.0). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

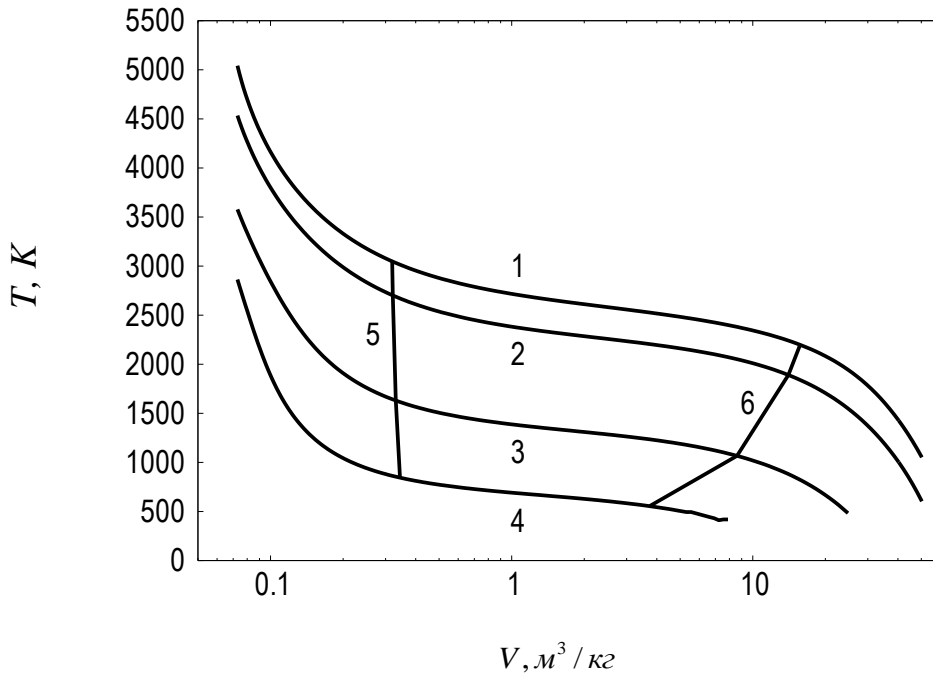


Рис. 3.11. Зависимость температуры от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1.0). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

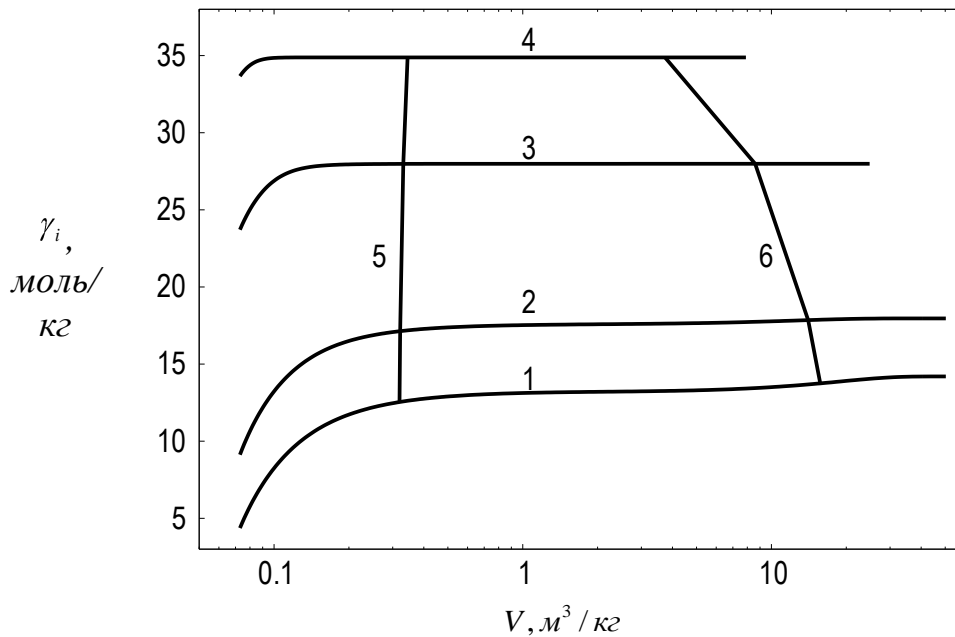


Рис. 3.12. Зависимость мольно-массовой концентрации паров воды вдоль равновесной адиабаты от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

Были проведены расчеты детонации стехиометрической водородо-воздушной горючей смеси с добавлением капель воды в многофазной

неравновесной постановке при стандартных условиях ($p = 1 \text{ атм.}$, $T = 298.15 \text{ К}$). Учитывались неравновесный процесс испарения капель воды и газофазные химические реакции (решалась система (2.26-2.34)). Варьировались массовая доля капель воды и начальный диаметр капель. Типичные распределения параметров течения в детонационной волне представлены на рисунках 3.13 – 3.16. Температура за ударной волной (рис.3.13) составляет около 1500 К, что существенно превышает температуру самовоспламенения водородо-воздушной горючей смеси, инициируется протекание экзотермических реакций (табл. 3.1) на некотором расстоянии от ударной волны происходит самовоспламенение горючей смеси и температура поднимается до $\sim 2900 \text{ К}$, при этом давление (рис.3.14) и скорость (рис. 3.15) газа уменьшаются, концентрация паров воды в смеси возрастает (рис. 3.16).

Данная картина течения полностью соответствует структуре детонационной волны в случае отсутствия капель воды (кривая 1 рис. 3.13-3.16), так как капли еще не успели испариться и оказывают слабое влияние на процесс самовоспламенения. Далее наблюдается влияние капель на структуру течения, которое сопровождается даже нагревом газа в случае значительных массовых долей капель (кривые 4, 5 рис. 3.13). На расстоянии 2-5 см от фронта ударной волны капли начинают активно испаряться, что приводит к увеличению содержания паров воды в составе продуктов сгорания (рис. 3.16), к снижению температуры (рис. 3.13) и росту давления (рис. 3.14) и скорости (рис. 3.15) потока. В представленных на рисунках вариантах зона активного протекания процесса испарения составляет от 10 см до 1 м.

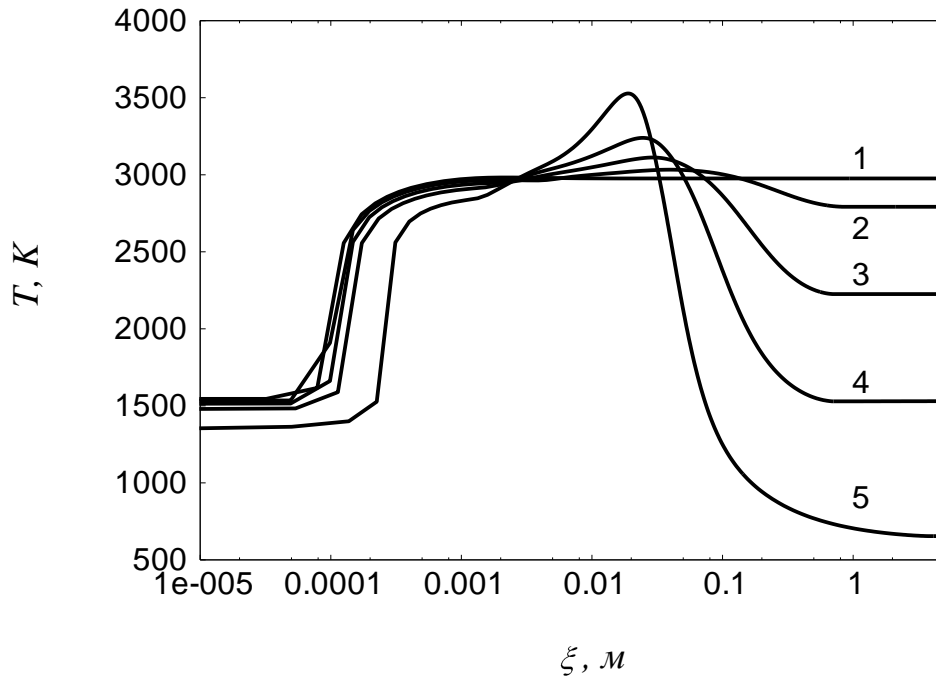


Рис. 3.13. Зависимость температуры от продольной координаты в волне Чепмена-Жуге при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.4; 4 – 1.0; 5 – 3.0). Начальный диаметр капель воды – 50 мкм

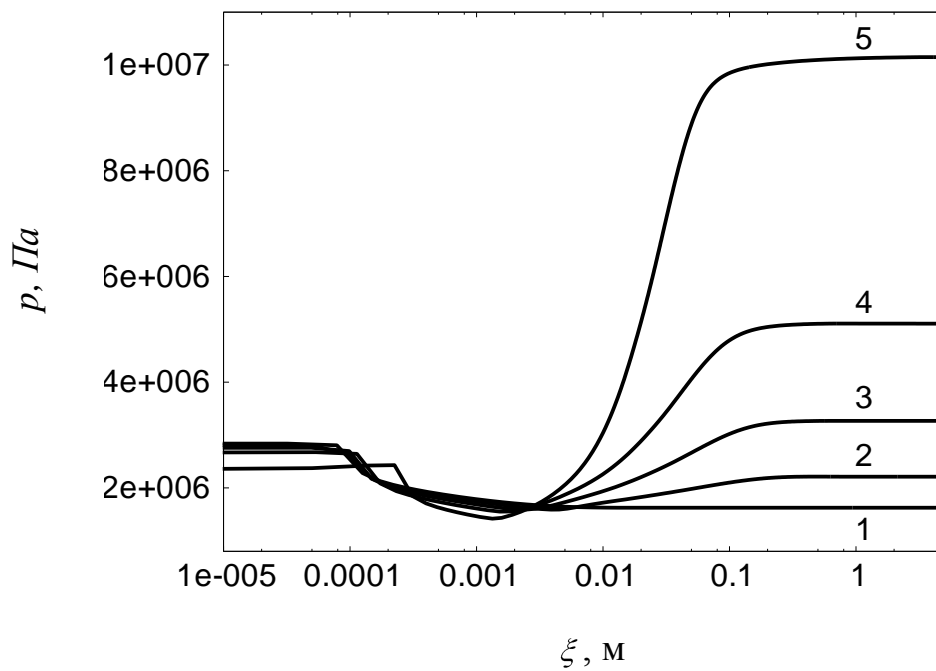


Рис. 3.14. Зависимость давления от продольной координаты в волне Чепмена-Жуге при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.4; 4 – 1.0; 5 – 3.0). Начальный диаметр капель воды – 50 мкм.

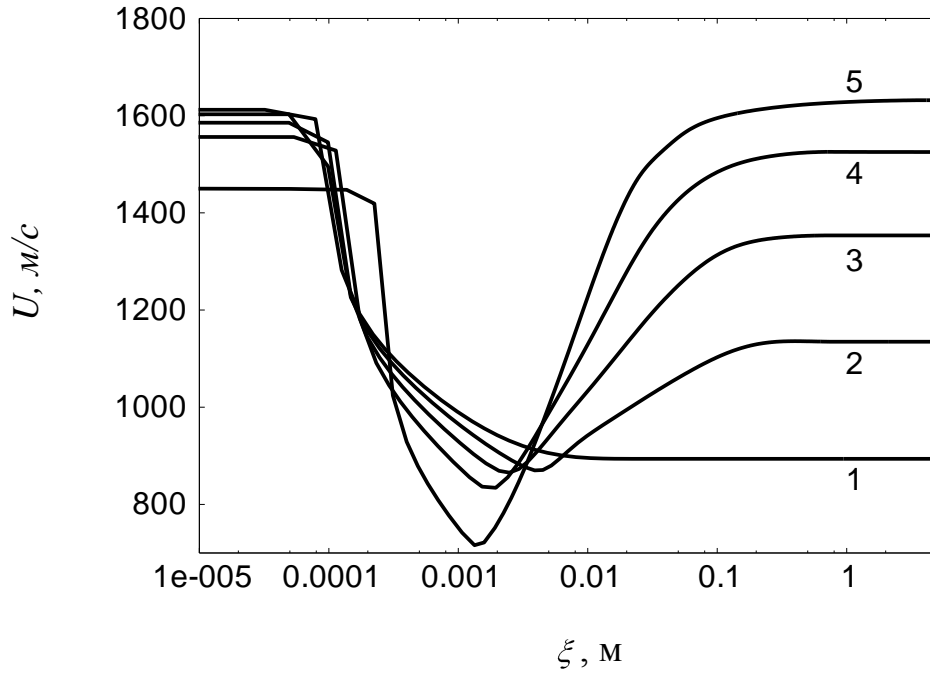


Рис. 3.15. Зависимость скорости газа от продольной координаты в волне Чепмена-Жуге при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.4; 4 – 1.0; 5 – 3.0). Начальный диаметр капель воды – 50 мкм

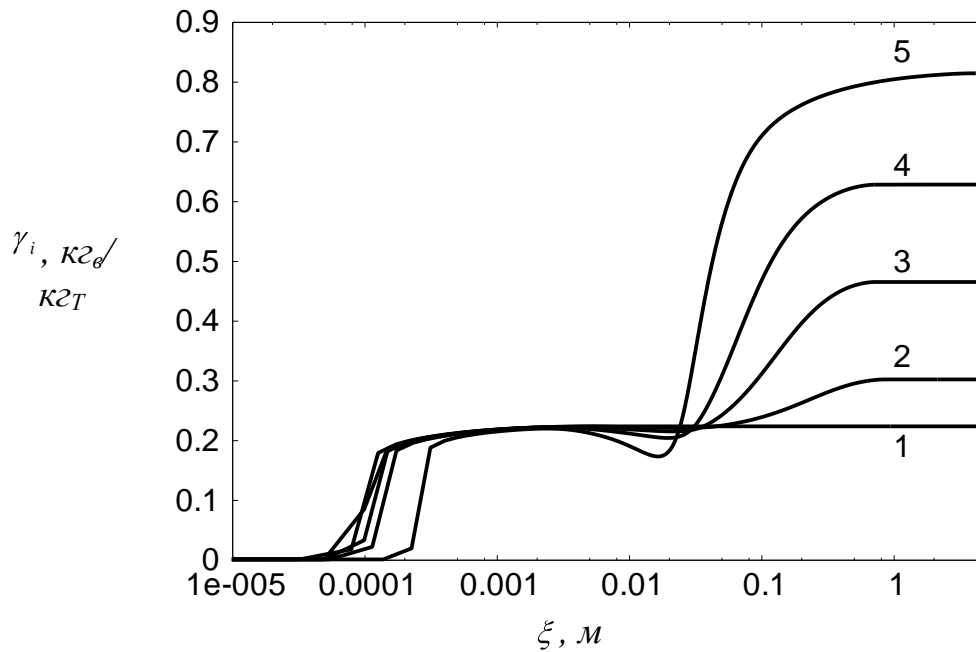


Рис. 3.16 Зависимость массовой доли паров воды от продольной координаты в волне Чепмена-Жуге от при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.4; 4 – 1.0; 5 – 3.0). Начальный диаметр капель воды – 50 мкм

Описанная картина течения соответствует случаю, когда времена испарения капель существенно превосходят время задержки воспламенения горючей смеси.

В случае, когда данные времена сравнимы, картина течения может существенно отличаться. Так, если мы рассмотрим капли воды с начальным диаметром 1 мкм (рис. 3.17), то при $m_{H_2O}/m_T = 0.239$ (кривая 2, рис. 3.17) наблюдается вышеописанная картина течения, а при $m_{H_2O}/m_T = 0.240$ (кривая 3, рис. 3.17), процесс испарения приводит к существенному понижению температуры горючей смеси, а следовательно к увеличению времени задержки воспламенения. В первом случае горючая смесь воспламеняется на расстоянии около 1 мм от ударной волны, а во втором на расстоянии 6 см. При $m_{H_2O}/m_T = 0.250$ (кривая 5, рис. 3.17) фронт самовоспламенения находится на расстоянии более 1 м от ударной волны и о детонационной волне может идти речь только в теоретическом смысле, как некоторой структуре распределения параметров отвечающей решению рассматриваемой системы уравнений.

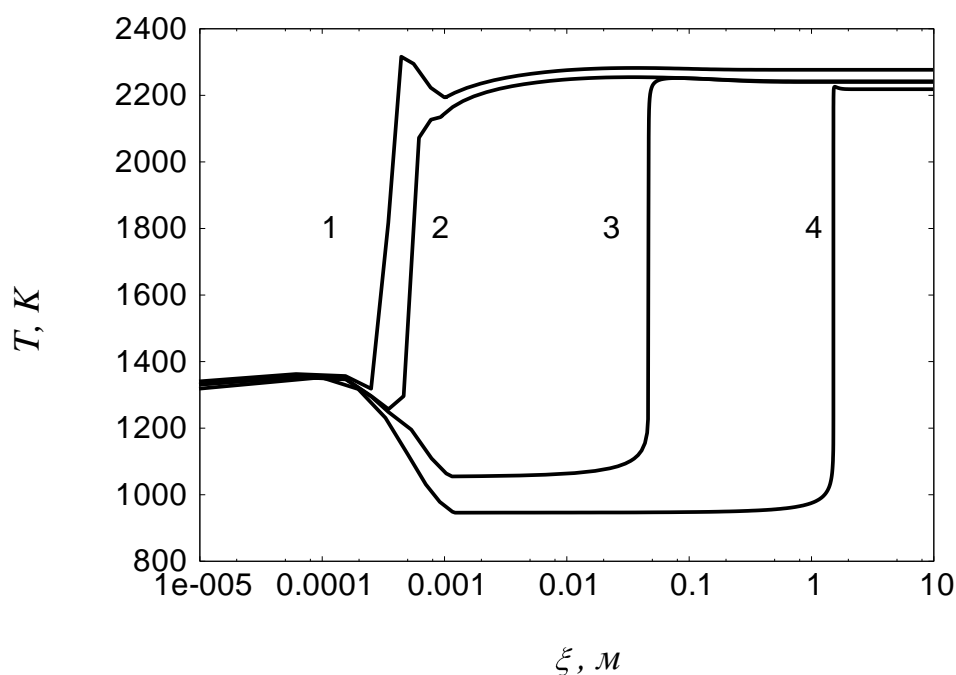


Рис. 3.17. Смена режимов воспламенения. Зависимость температуры в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.230; 2 – 0.239; 3 – 0.240; 4 – 0.250). Диаметр капель воды – 1 мкм

Было проведено исследование влияния капель воды на параметры детонации Чепмена-Жуге (рис. 3.17). Под детонацией Чепмена-Жуге мы понимаем минимальную скорость ударной волны начиная с которой всегда

существует решение системы уравнений (2.26-2.34). С увеличением массовой доли капель наблюдается снижение скорости детонации Чепмена-Жуге и температуры смеси. Аналогичная тенденция наблюдается и при уменьшении диаметра капель при фиксированной массовой доле. Обнаружено, что для диаметров капель менее 50 мкм существует предельная массовая доля капель начиная с которой решение рассматриваемой системы существует при всех рассмотренных режимах и детонация Чепмена-Жуге отсутствует. Также необходимо отметить, что скорость детонации Чепмена-Жуге и температура смеси при наличии капель выше чем, рассчитанная в идеальной постановке с полным испарением капель (рассмотренная ранее на рис. 3.6-3.12), штрих-пунктирные кривые рис. 3.18.

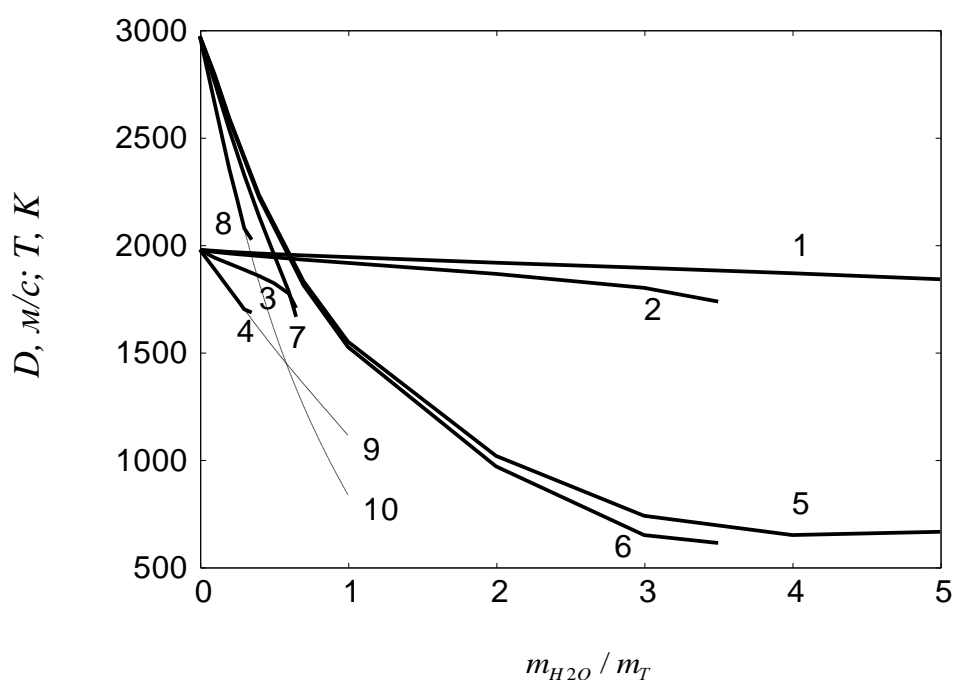


Рис. 3.18. Зависимость скорости детонации Чепмена-Жуге (1-4,9) и температуры (5-8,10) от отношения массы капель к массе топлива при различных диаметрах капель (100 мкм – 1,5; 50 мкм – 2,6; 10 мкм – 3, 7; 1 мкм – 4,8). Линии 9 и 10 соответствуют идеальному расчету

Исследовалась зависимость длин полного испарения капель воды различного начального диаметра в волнах Чепмена-Жуге в зависимости от массовой доли капель (рис. 3.19-3.22). Обнаружено, что при малых содержаниях капель воды и при росте их массовой доли длины испарения капель

увеличиваются (кривые 1-3 рис. 3.19-3.21). При больших содержаниях капель воды в смеси (для 10 мкм - $m_{H_2O}/m_T > 0.5$, для 50 мкм - $m_{H_2O}/m_T > 1.0$) длина полного испарения капель увеличивается с ростом m_{H_2O}/m_T . Такое поведение системы связано с тем, что скорость испарения прямо пропорциональна температуре стационарного испарения капель и обратно пропорциональна парциальному давлению паров воды во внешней среде. Температура стационарного испарения (рис. 3.22) и концентрация паров воды (рис. 3.23) растут с ростом m_{H_2O}/m_T . При больших массовых долях воды существуют режимы когда реализуется двухфазное равновесие, при котором температуры продуктов сгорания и капель воды сравниваются и капли перестают испаряться (кривая 6, рис. 3.20; кривая 5, рис. 3.21).

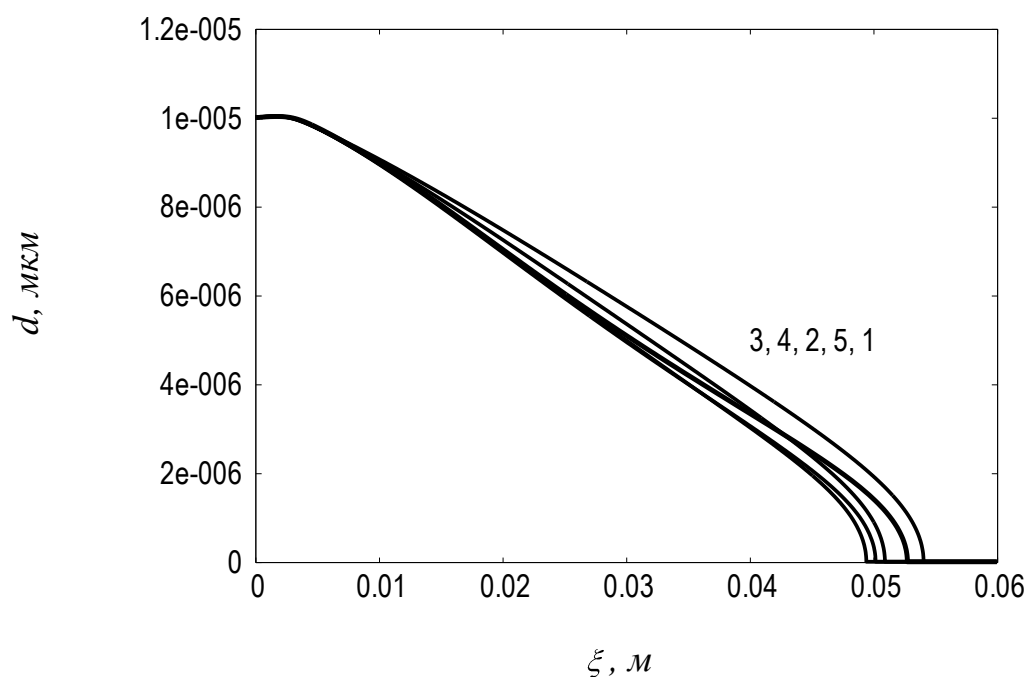


Рис. 3.19. Зависимость диаметра капли в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.4; 4 – 0.5; 5 – 0.6). Диаметр капель воды – 10 мкм

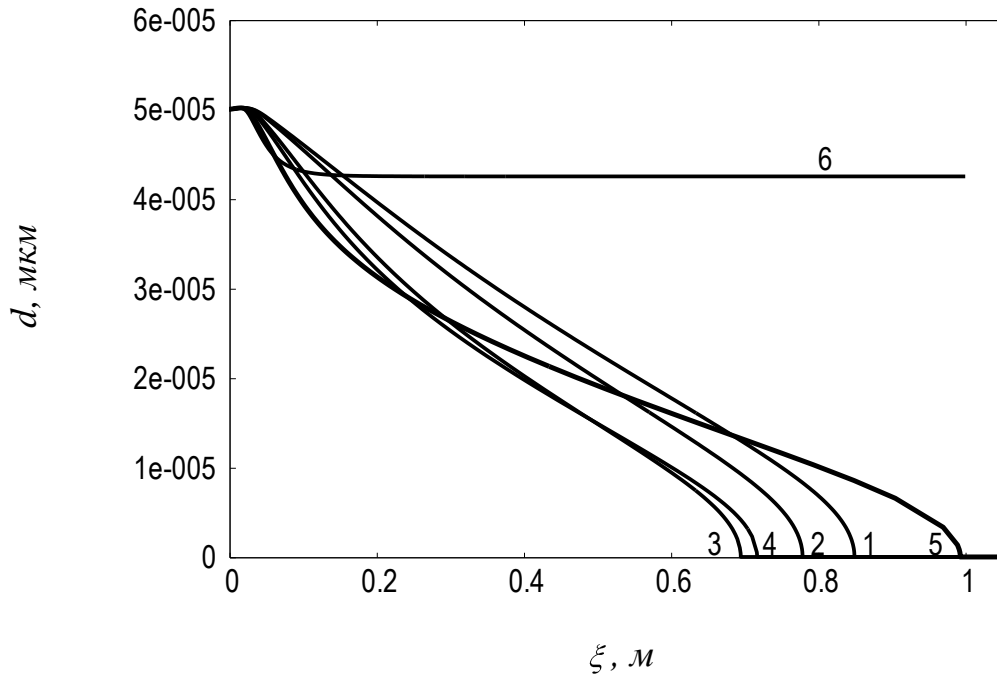


Рис.3.20. Зависимость диаметра капли в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.7; 4 – 1.0, 5 – 2.0; 6 – 5.0). Диаметр капель воды – 50 мкм

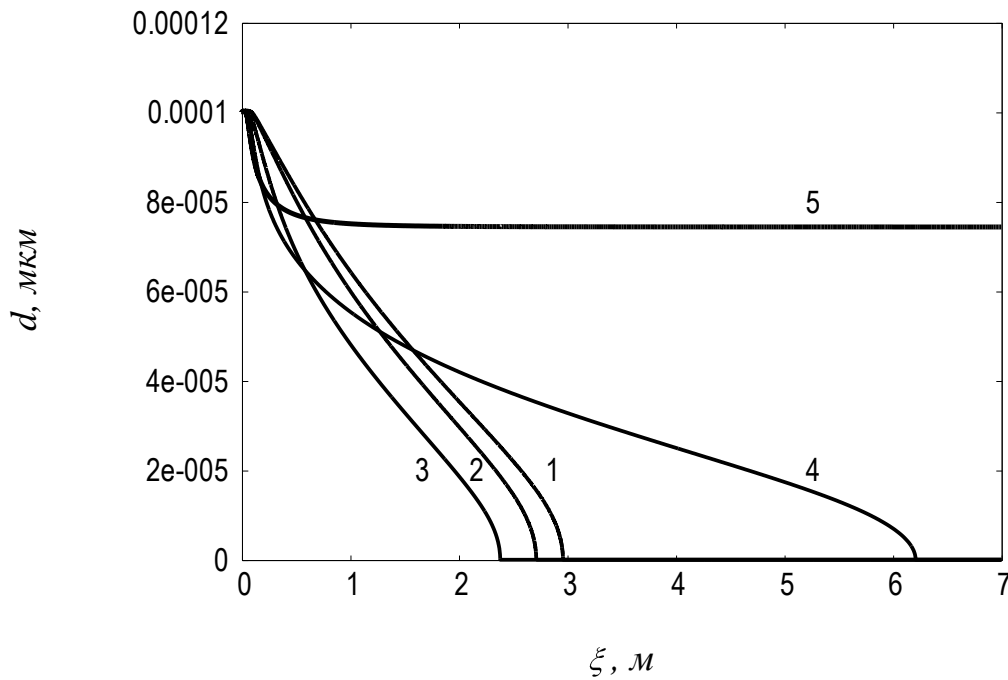


Рис. 3.21. Зависимость диаметра капли в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 1.0; 4 – 3.0, 5 – 5.0). Диаметр капель воды – 100 мкм

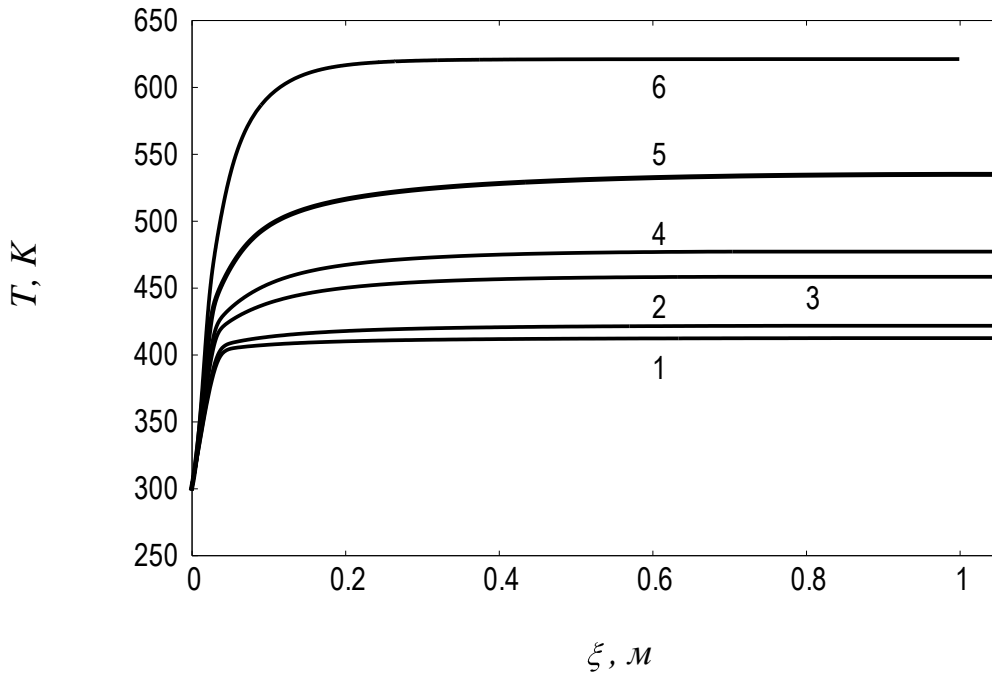


Рис. 3.22. Зависимость температуры капли в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 - 0.1; 2 - 0.2; 3 - 0.7; 4 - 1.0, 5 - 2.0; 6 - 5.0). Диаметр капель воды - 50 мкм

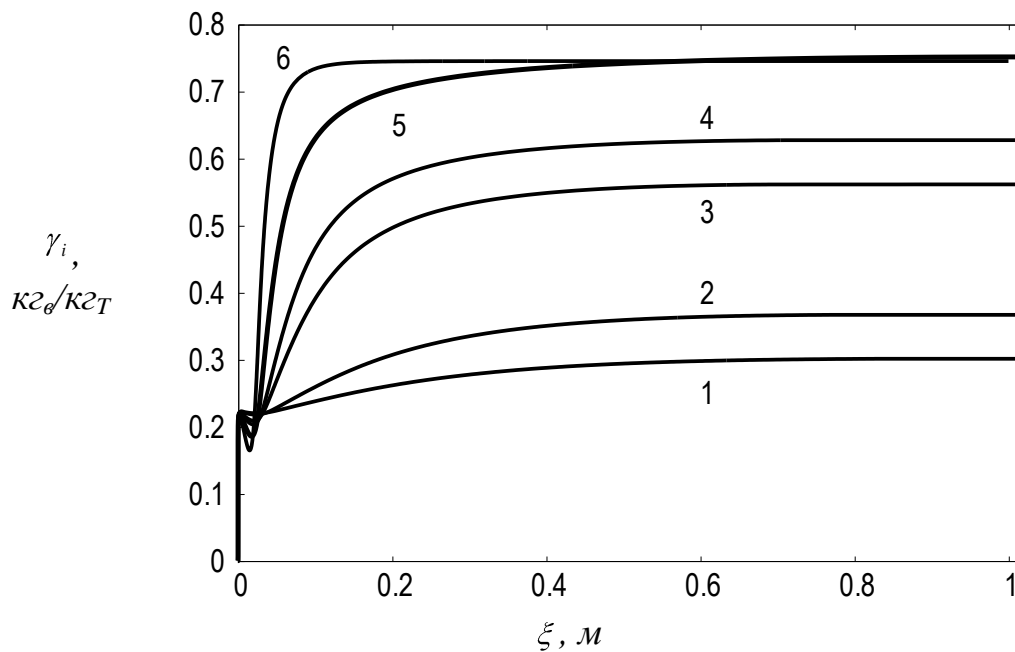


Рис. 3.23. Зависимость массовых концентраций паров воды в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 - 0.1; 2 - 0.2; 3 - 0.7; 4 - 1.0, 5 - 2.0; 6 - 5.0). Диаметр капель воды - 50 мкм

Для анализа получаемых решений можно рассмотреть протекающий процесс на фазовых плоскостях $p-V$ и $V-T$. Кривая 1 рис. 3.24-3.25 - ударная адиабата - соответствует состоянию смеси, реализуемому за ударной волной, т.е. началу траектории на фазовой плоскости, далее параметры описывают фазовую траекторию (кривые 4-8), которая, если решение существует, заканчивается на равновесной детонационной адиабате (кривая 2) или обрывается (кривая 4), если решения у системы уравнений нет. Из рисунков 3.24-3.25 видно, что точки начала и окончания траектории зависят исключительно от массовой доли воды и не зависят от диаметра капель (кривые 5-6, 7-8). В случае чисто газовой детонации, фазовой траекторией процесса на плоскости $p-V$ является отрезок прямой линии. В случае газок капельной смеси, траектория соответствует поведению системы качественно описанному выше. На рисунке 3.26 приведен увеличенный участок траектории на плоскости $V-T$, из которого видно, что фазовая траектория в точности заканчивается на равновесной детонационной адиабате. Кривые 2 и 3 рис. 3.25 соответствуют кривым 7 и 8 рис. 3.24.

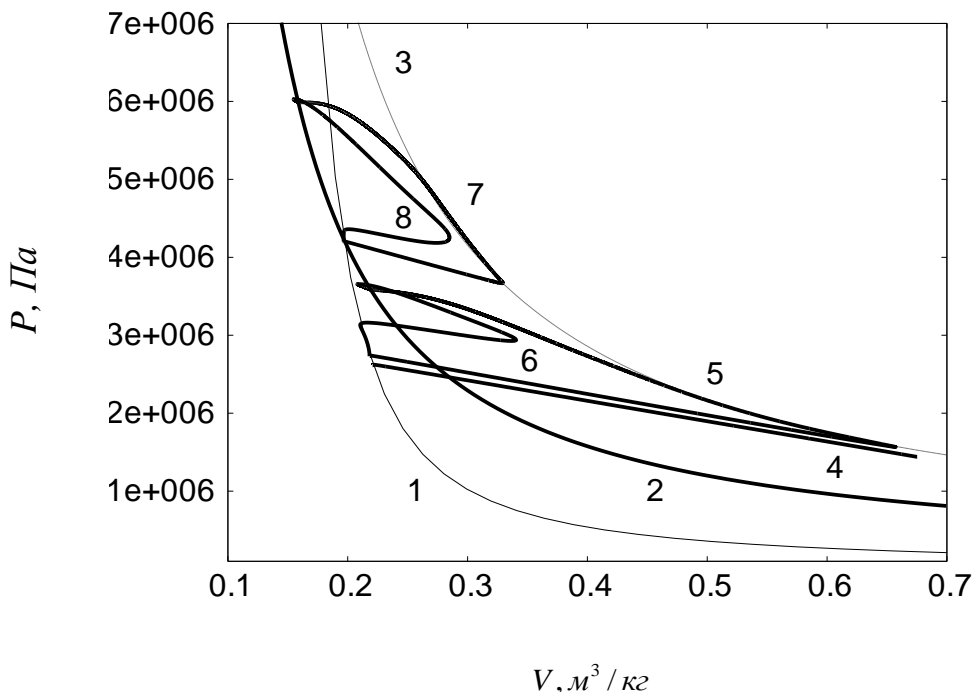


Рис. 3.24. $p-V$ диаграмма. 1- ударная адиабата; 2 –детонационная адиабата; 3 – детонационная адиабата, соответствующая отсутствию капель воды; 4 – $D=1900$ м/с – решение отсутствует ($d=50$ мкм); 5 – $D= 1942$ м/с – минимальная скорость

при которой существует решение ($d = 50 \mu\text{мкм}$); 6 – $D = 1942 \text{ м/с}$, $d = 1 \mu\text{мкм}$; 7 – $D = 2400 \text{ м/с}$, $d = 50 \mu\text{мкм}$; 8 – $D = 2400 \text{ м/с}$, $d = 1 \mu\text{мкм}$

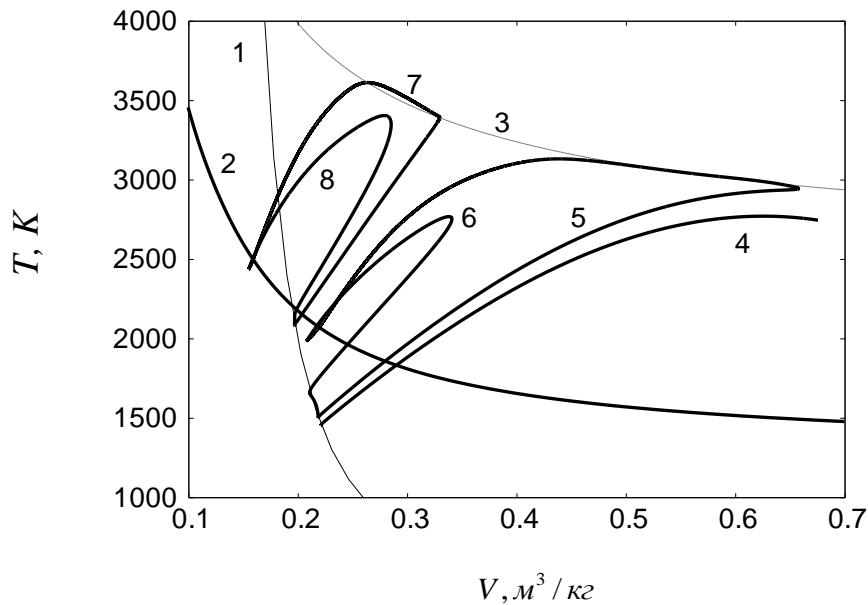


Рис. 3.25. V - T диаграмма. 1 – ударная адиабата; 2 – детонационная адиабата; 3 – детонационная адиабата, соответствующая отсутствию капель воды; 4 – $D=1900 \text{ м/с}$ – решение отсутствует ($d = 50 \mu\text{мкм}$); 5 – $D= 1942 \text{ м/с}$ – минимальная скорость при которой существует решение ($d = 50 \mu\text{мкм}$); 6 – $D= 1942 \text{ м/с}$, $d = 1 \mu\text{мкм}$; 7 – $D= 2400 \text{ м/с}$, $d = 50 \mu\text{мкм}$; 8 – $D= 2400 \text{ м/с}$, $d = 1 \mu\text{мкм}$

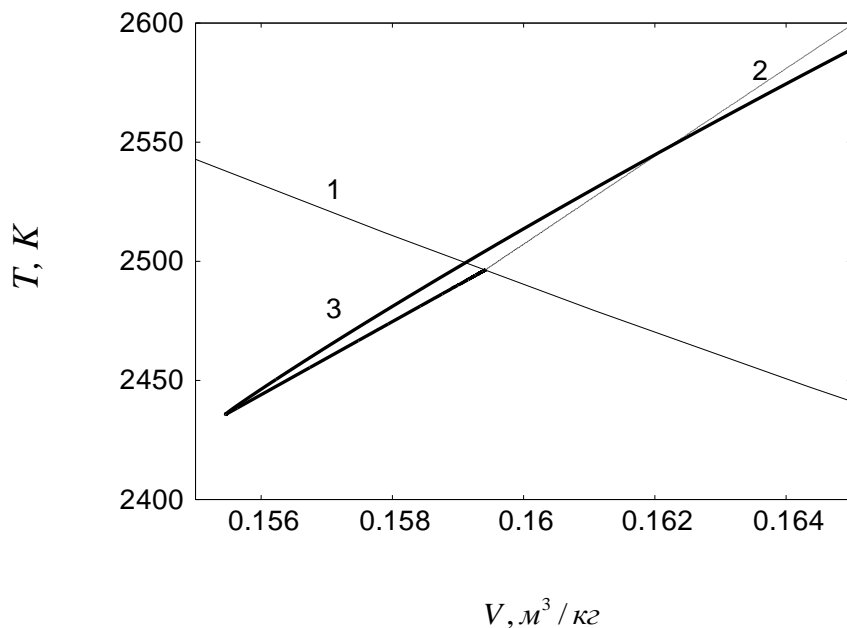


Рис. 3.26. V - T диаграмма. 1 – детонационная адиабата; 2 – фазовая траектория 50 мкм; 3 – фазовая траектория 1 мкм

Необходимо отметить, что кривые 4-8 получены путем интегрирования достаточно сложной системы дифференциально- алгебраических уравнений (2.26-2.34), причем для получения стационарной точки требуется выполнить несколько тысяч, а иногда и сотен тысяч шагов, а кривая 6 получена путем решения системы нелинейных алгебраических уравнений (2.39-2.42). Точное попадание решения дифференциально-алгебраических уравнений в точку, лежащую на кривой 6 свидетельствует о высокой точности разработанных алгоритмов численного интегрирования, обеспечивающих точное выполнение законов сохранения массы, импульса, энергии и химических элементов в двухфазной реагирующей смеси.

3.1.3 Смесь метана с воздухом

В начале рассматривается стехиометрическая метано-воздушная горючая смесь с добавлением капель воды в предположении, что капли воды полностью испарились и достигнуто состояние термодинамического равновесия. Продукты сгорания моделировались двенадцатью компонентами: CO , CO_2 , CH_3 , CH_4 , HCO , H_2 , OH , H_2O , O_2 , N_2 , H , O . Изучалось влияние на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции отношения массы капель воды к массе водородо-воздушной смеси ($m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}}$) в начальном составе (рис. 3.27-3.33). При изменении $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}}$ от 0 до 1 температура продуктов сгорания в состоянии Чепмена-Жуге изменялась от 2800 К до 600 К при детонации (кривая 2 рис. 3.27) и от 2000 К до 500 К при дефлаграции. В состав продуктов сгорания (рис. 3.28, 3.30, 3.33) в основном входили азот, вода и углекислый газ, при $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}} < 0.2$ в заметных концентрациях присутствовали кислород, угарный газ, водород и радикал OH . Необходимо отметить наличие точки минимума на графике скорости дефлаграции (рис. 3.29) при $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}} = 0.4$ и слабую зависимость давления от $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}}$ при дефлаграции (рис. 3.29, 3.32).

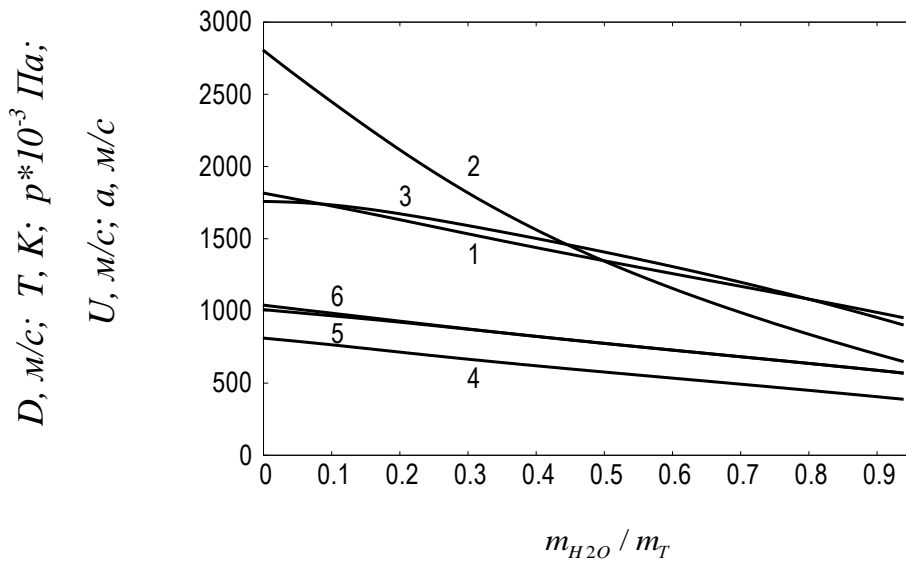


Рис. 3.27. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге в зависимости от отношения масс воды и газовой смеси (метан+ воздух) (1 - Скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 - температура, 3 - давление (*0.001), 4 - скорость потока, 5 - равновесная скорость звука, 6 - замороженная скорость звука)

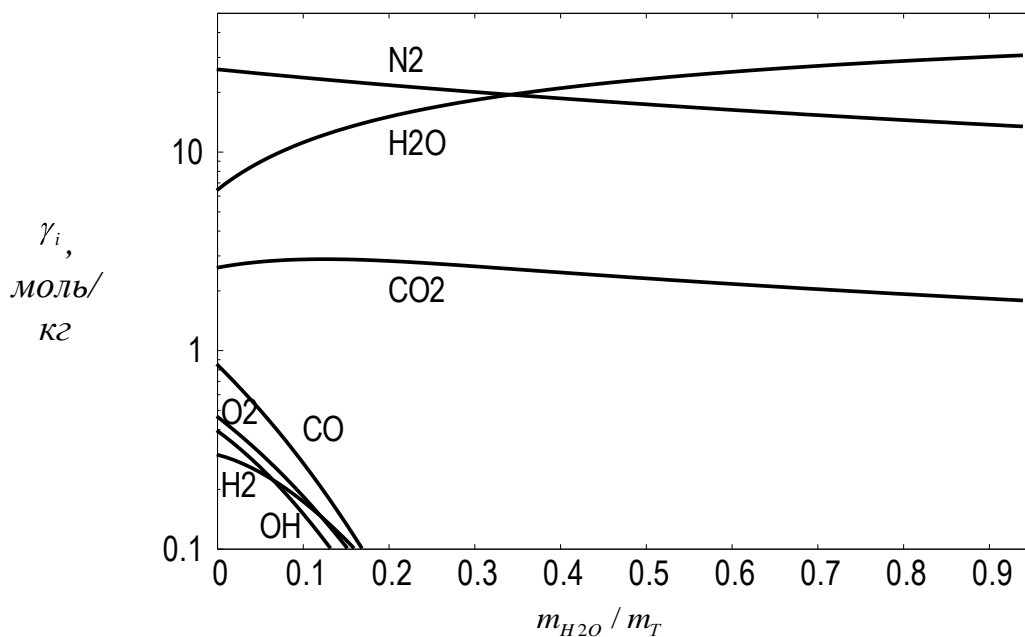


Рис. 3.28. Зависимость мольно-массовых концентраций компонентов в точке Чепмена-Жуге детонации в зависимости от отношения массы воды к массе топлива

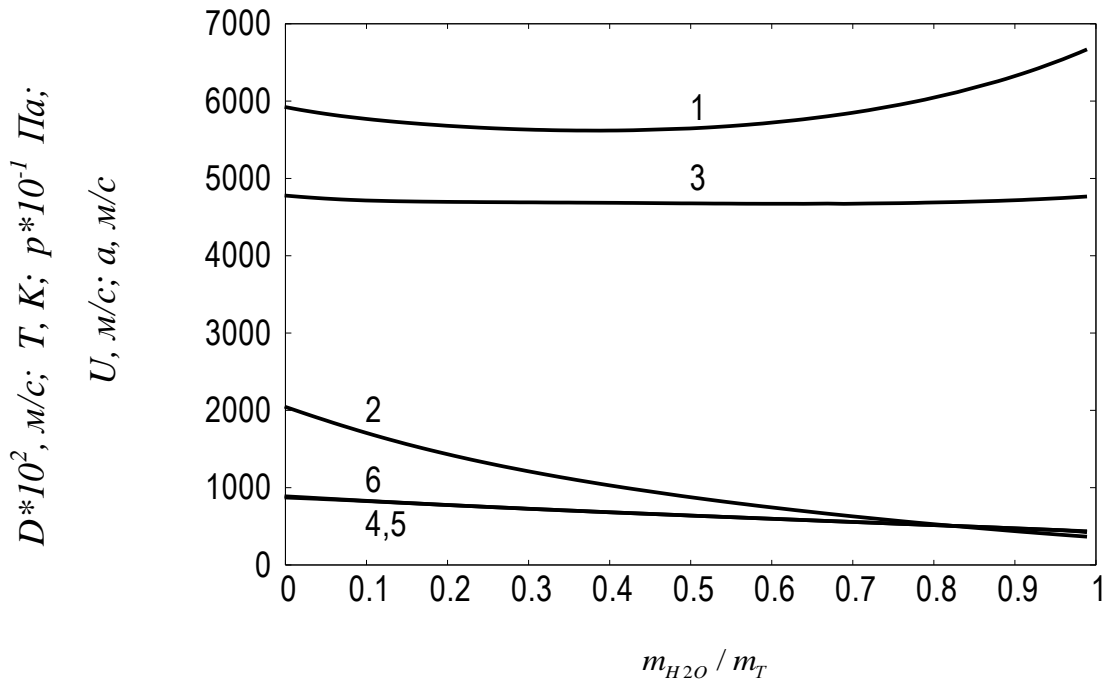


Рис. 3.29. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге дефлаграции от отношения массы воды к массе топлива (1 - начальная скорость потока Чепмена-Жуге (*100), 2 - температура, 3 - давление (*0.1), 4 - скорость потока, 5 - равновесная скорость звука, 6 – замороженная скорость звука)

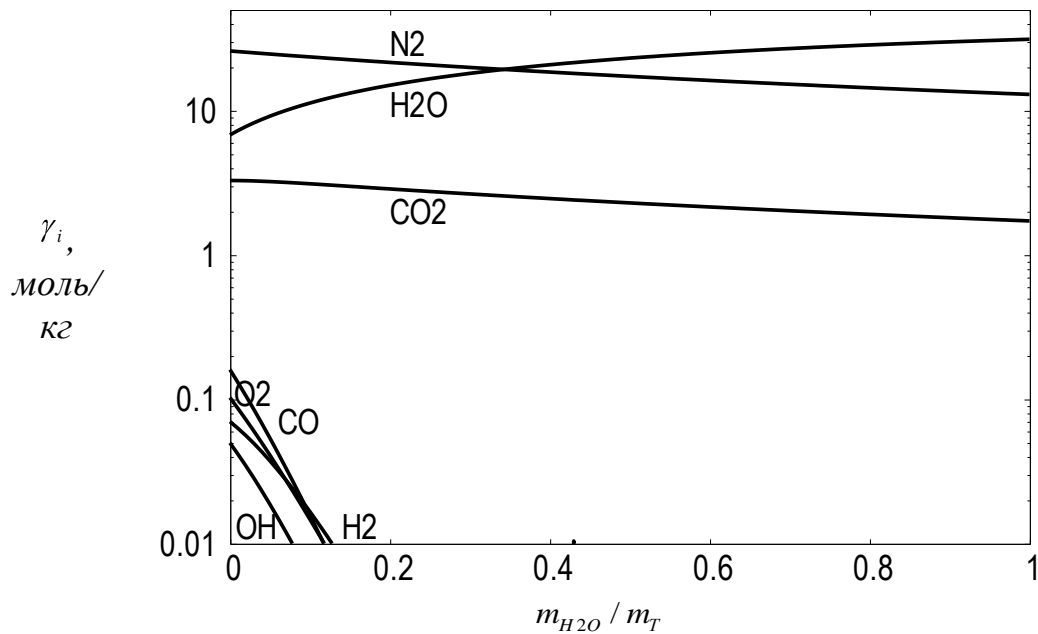


Рис. 3.30. Зависимость мольно-массовых концентраций компонентов в точке Чепмена-Жуге дефлаграции от отношения массы воды к массе топлива.

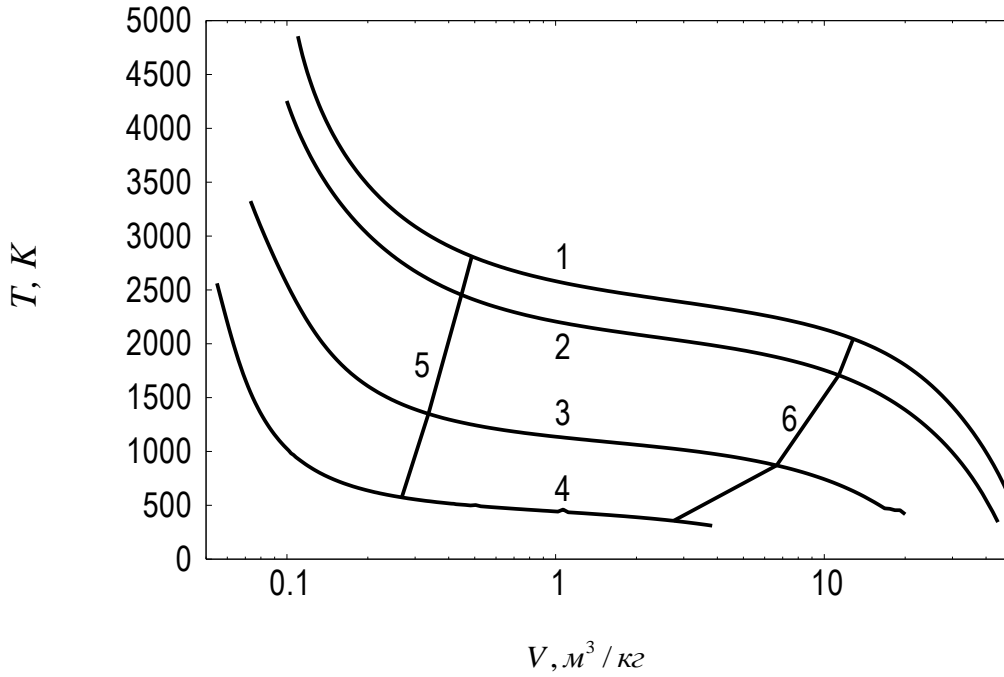


Рис. 3.31. Зависимость температуры от удельного объема вдоль равновесной адиабаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1.0) (метан+воздух). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

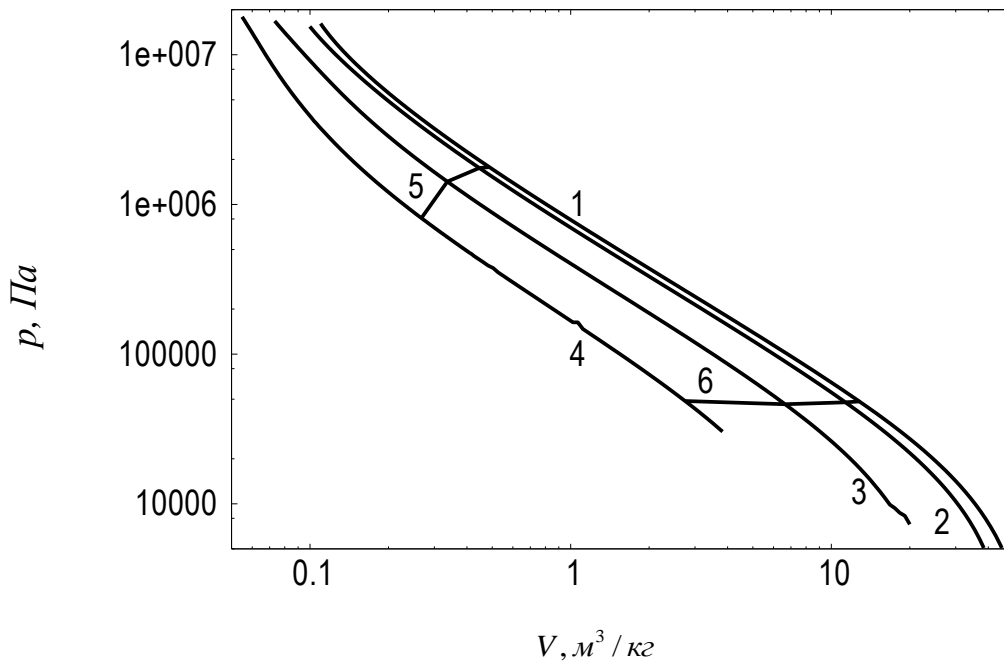


Рис. 3.32. Зависимость давления вдоль равновесной адиабаты от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1.0) (метан+воздух). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

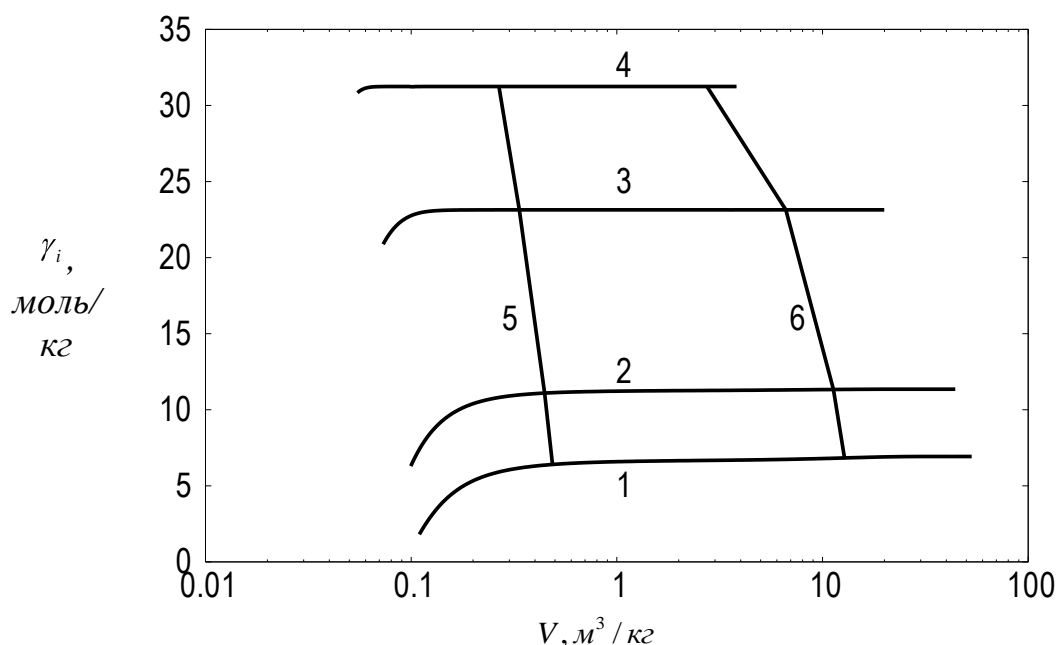


Рис. 3.33 . Зависимость мольно-массовой концентрации паров воды вдоль равновесной адиабаты от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1) (метан+воздух). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции

Были проведены расчеты детонации стехиометрической метано-воздушной горючей смеси с добавлением капель воды в многофазной неравновесной постановке (решалась система уравнений 2.26-2.34) при стандартных условиях ($p = 1 \text{ атм}$, $T = 298.15 \text{ К}$). Учитывались неравновесный процесс испарения капель воды и газофазные химические реакции. Используемый в расчетах упрощенный механизм горения метана в воздухе [222] приведен в таблице 3.2. Варьировались массовая доля капель воды и начальный диаметр капель. Типичные распределения параметров течения в детонационной волне при различных отношениях масс капель воды к массе топлива представлены на рисунках 3.34 – 3.37. В случае, когда температура за ударной волной (рис. 3.34) превышает температуру самовоспламенения горючей смеси, начинают конкурировать два процесса химические реакции в результате которых тепло выделяется в газ и испарение капель воды, которое приводит к поглощению тепла. Сценарий первый, если тепла выделяется больше чем поглощается, то вблизи ударной волны происходит воспламенение горючей смеси (кривые 1-3 рис. 3.34-3.37). После воспламенения, при переходе системы к равновесному состоянию

тепловыделение уменьшается и из-за испарения температура смеси уменьшается по сравнению со случаем воспламенения чисто газовой горючей смеси (кривая 0 рис. 3.34). Кривая 4 рис. 3.34-3.37 соответствует случаю, когда потери тепла за счет испарения вблизи ударной волны превосходят приток тепла за счет химических реакций. В этом случае температура смеси снижается. Сценарий второй, если уровень температуры после полного испарения капель превышает температуру самовоспламенения смеси, то воспламенение и полное сгорание смеси происходит (кривая 4 рис. 3.34-3.37). Необходимо отметить, что в приведенном на рисунке случае, воспламенение наблюдается на расстоянии 2000 м от ударной волны, что к реальности, конечно, отношения не имеет, но в тоже время свидетельствует о высокой точности разработанных алгоритмов.

Таблица. 3.2. Упрощенный кинетический механизм горения стехиометрической смеси метана с воздухом

Реакция										Коэффициенты ф-лы Аррениуса		
CH ₄	+	M			<=>	CH ₃	+	H	M	1.000E+12	0.00	4.450E+04
CH ₄	+	OH			<=>	CH ₃	+	H ₂ O		2.800E+07	0.00	2.500E+03
CH ₄	+	O			<=>	CH ₃	+	OH		2.000E+07	0.00	4.640E+03
CH ₄	+	H			<=>	CH ₃	+	H ₂	+ M	6.900E+07	0.00	5.950E+03
CH ₃	+	O ₂			<=>	HCO	+	H ₂ O		6.170E+03	-0.50	0.00
CH ₃	+	O			<=>	HCO	+	H ₂		1.000E+08	0.00	0.00
HCO	+	OH			<=>	CO	+	H ₂ O		1.000E+08	0.00	0.00
HCO	+	M			<=>	H	+	CO	+ M	2.000E+06	0.50	1.440E+04
CO	+	OH			<=>	CO ₂	+	H		5.600E+05	0.00	545.
H	+	O ₂			<=>	O	+	OH		2.200E+08	0.00	8.340E+03
H ₂	+	O			<=>	H	+	OH		1.700E+07	0.00	4.750E+03
H ₂ O	+	O			<=>	OH	+	OH		5.800E+07	0.00	9.070E+03
H ₂ O	+	O			<=>	OH	+	OH		5.800E+07	0.00	9.070E+03
H ₂ O	+	H			<=>	H ₂	+	OH		8.400E+07	0.00	1.010E+04
H	+	OH	+	M	<=>	H ₂ O	+	M		4.000E+07	-1.00	0.00
H	+	H	+	M	<=>	H ₂	+	M		1.500E+06	-1.00	0.00
O	+	O	+	M	<=>	O ₂	+	M		4.000E+05	-1.00	0.00
O	+	H	+	M	<=>	OH	+	M		5.300E+03	0.00	2.780E+03

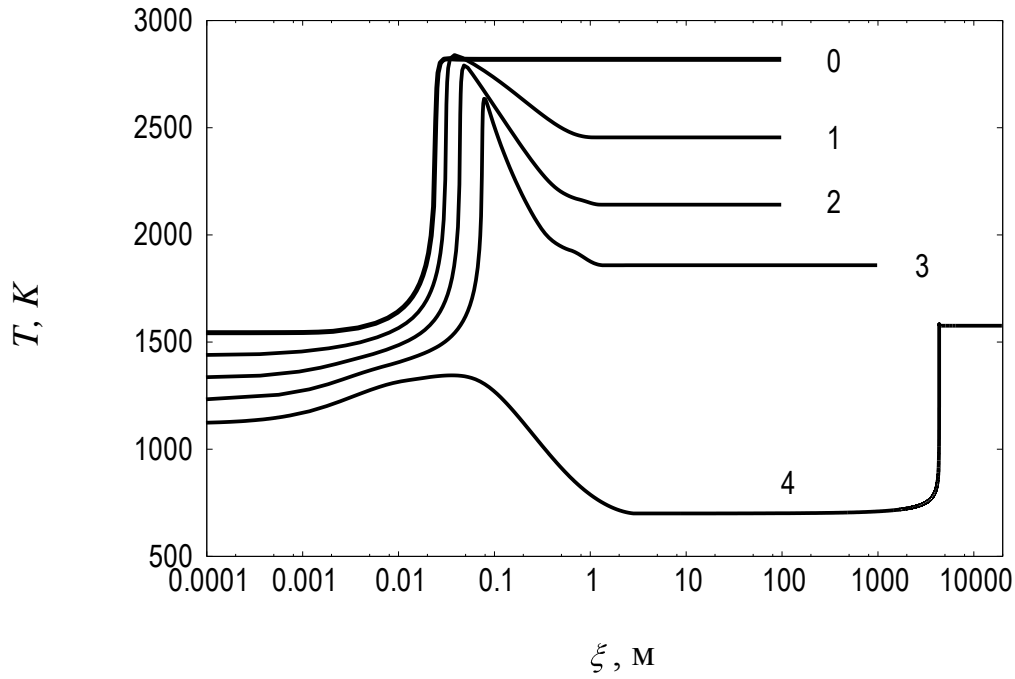


Рис. 3.34. Зависимость температуры продуктов сгорания в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (0 – 0; 1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.3, 4 – 0.4) (метан+воздух), $d = 50 \text{ мкм}$

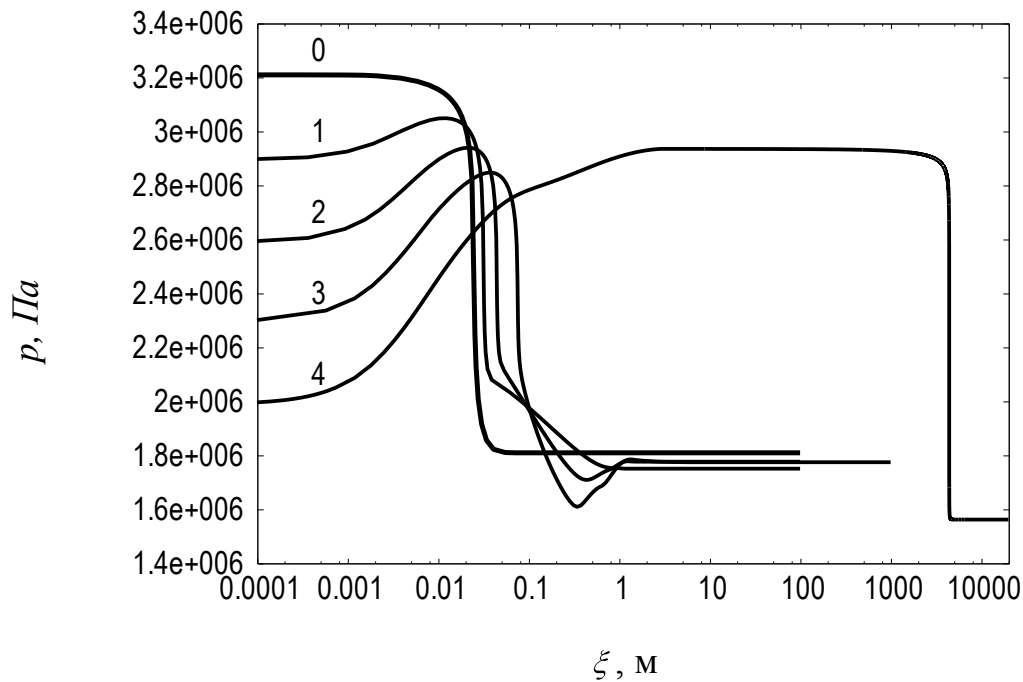


Рис. 3.35. Зависимость давления продуктов сгорания в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (0 – 0; 1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.3, 4 – 0.4), $d = 50 \text{ мкм}$

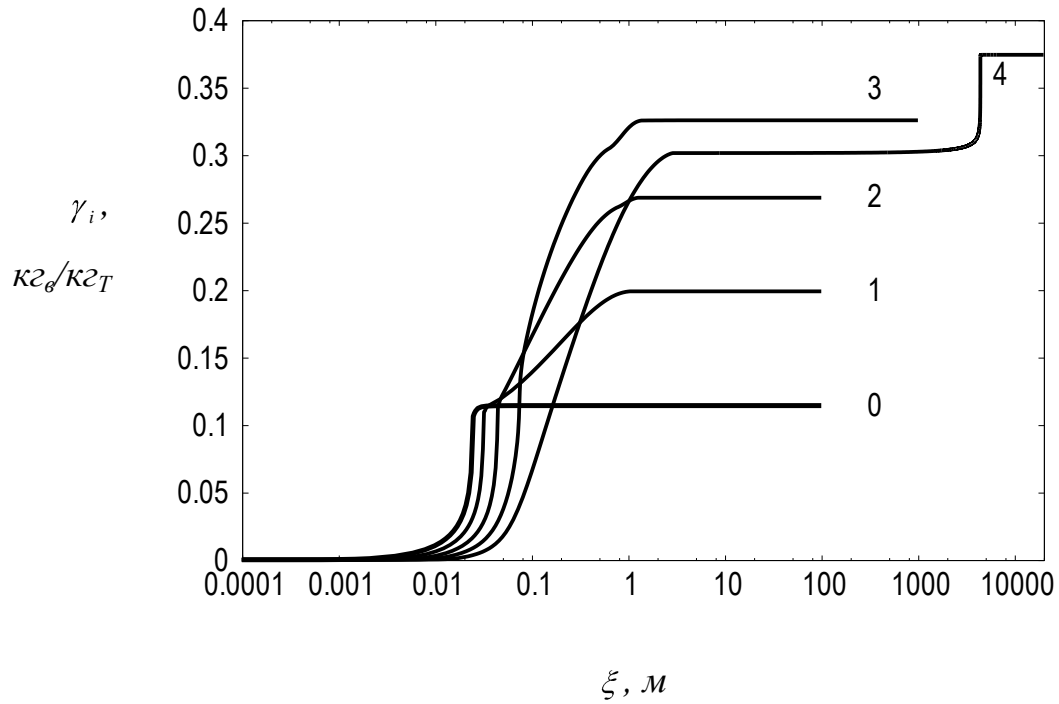


Рис. 3.36. Зависимость массовой концентрации паров воды в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (0 – 0; 1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.3, 4 – 0.4) (метан+воздух), $d = 50 \text{ мкм}$

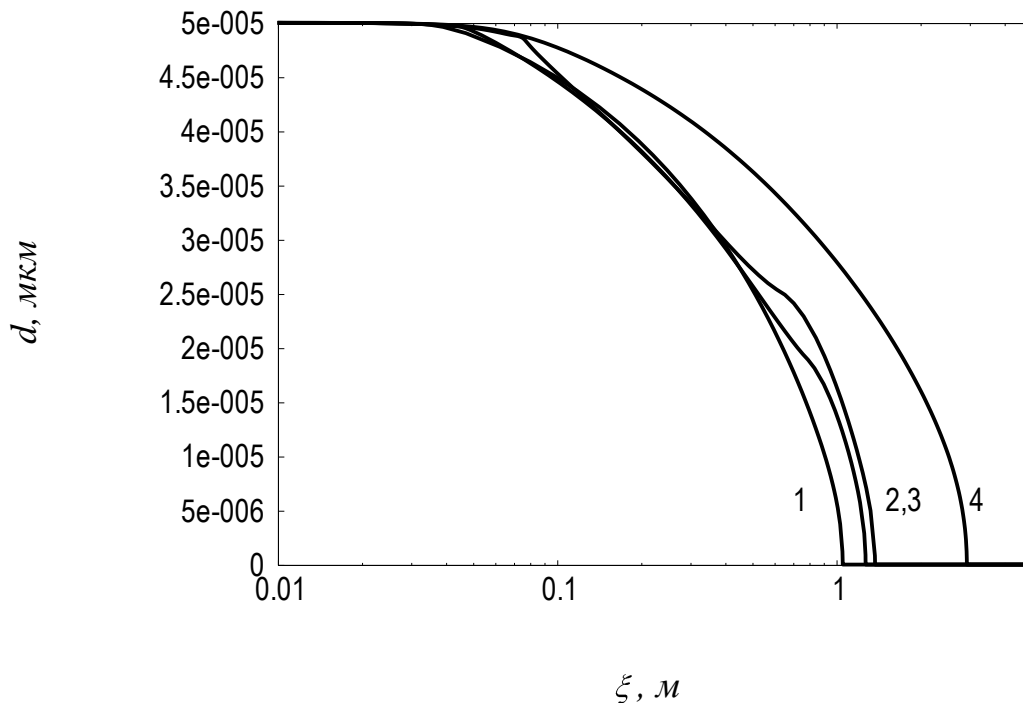


Рис. 3.37. Зависимость диаметра капель воды в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (0 – 0; 1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.3, 4 – 0.4) (метан+воздух), $d = 50 \text{ мкм}$

Расчетным путем определялись параметры детонации Чепмена-Жуге для рассматриваемой газок капельной смеси (рис. 3.38). Получено, что при $m_{H_2O}/m_T > 0.4$ для капель воды диаметром от 10 до 50 мкм точку Чепмена-Жуге найти не удалось, это связано с тем, что из-за испарения температура смеси снижалась до уровня меньшего, чем температура самовоспламенения. В этом случае, т.е. для изучения воспламенения горючей смеси вблизи порога самовоспламенения необходимо использовать более подробные кинетические механизмы. При $m_{H_2O}/m_T < 0.4$, скорости детонации Чепмена-Жуге, полученные с учетом кинетики испарения и равновесной модели отличались слабо.

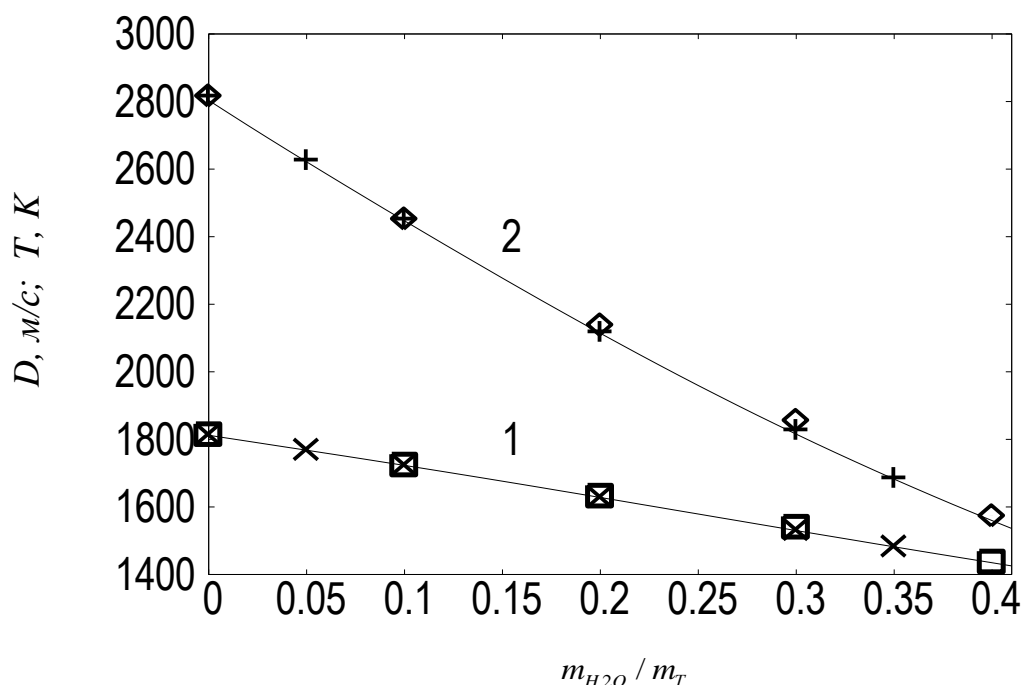


Рис. 3.38. Зависимость скорости детонации Чепмена-Жуге (1) и температуры (2) от отношений массы капель к массе топлива при различных диаметрах капель (линии – идеальный расчет, маркера – капли, диаметром 10 и 50 мкм)

Рассмотрим поведение системы на фазовых плоскостях $p-V$ и $p-T$ на примере расчета, выполненного для капель диаметром 10 и 50 мкм и $m_{H_2O}/m_T = 0.4$ (рис. 3.39-3.40). Случаю детонации Чепмена-Жуге соответствует кривая 4 (рис. 3.39-3.40), зависимости изменения параметров течения как функции расстояния от ударной волны приведены на рисунках 3.34-3.37, кривая 4.

Первый сценарий, фазовая траектория начинается на ударной адиабате 1. В начале наблюдается рост плотности смеси, который сопровождается ростом давления и, в начале небольшим ростом, а затем существенным падением температуры; далее процесс идет с уменьшением плотности и давления, и ростом температуры, который заканчивается в точке на равновесной детонационной адиабате (кривая 2, рис. 2). Кривая 5 соответствует случаю пересжатой детонации ($D=1600$ м/с), при этом поведение фазовой траектории существенно отличается от описанного выше.

Второй сценарий. В начале, давление и температура заметно возрастают, практически при неизменном объеме, затем плотность и давление уменьшаются, температура продолжает возрастать, причем параметры практически доходят до равновесной детонационной адиабаты горючей смеси при отсутствии капель (кривая 3, рис. 3.39-3.40); далее, из-за испарения капель плотность смеси растет, а давление и температура уменьшаются. Необходимо отметить, что для частиц диаметром 10 мкм при скорости детонационной волны 1600 м/с фазовая траектория соответствует первому сценарию развития событий.

При скорости детонационной волны 1800 м/с и для 10 мкм и для 50 мкм частиц фазовые траектории соответствуют второму сценарию. В целом первый сценарий изменения параметров можно интерпретировать как детонационную волну, второй сценарий как срыв детонации, а промежуточные режимы как возможность для развития галопирующей детонации.

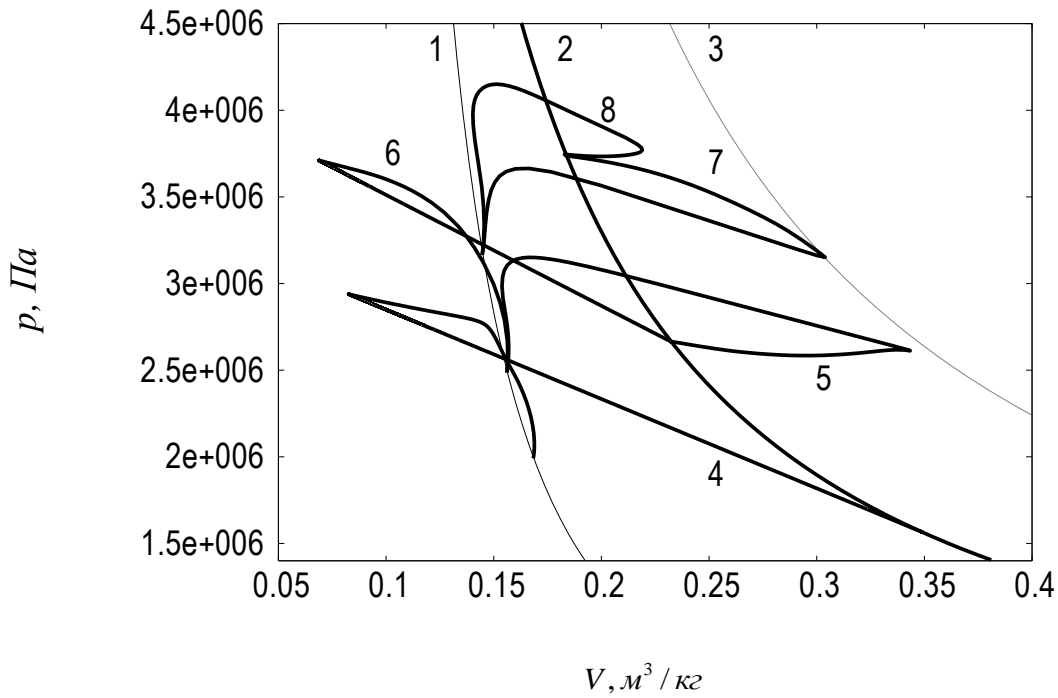


Рис. 3.39. p - V диаграмма. 1- ударная адиабата; 2 –детонационная адиабата; 3 – детонационная адиабата, соответствующая отсутствию капель воды; 4 – $D=1436$ м/с – минимальная скорость при которой существует решение ($d=50$ мкм); 5 - $D=1600$ м/с, $d=50$ мкм; 6 – $D=1600$ м/с, $d=10$ мкм; 7 - $D=1800$ м/с, $d=50$ мкм, 8 - $D=1800$ м/с, $d=10$ мкм

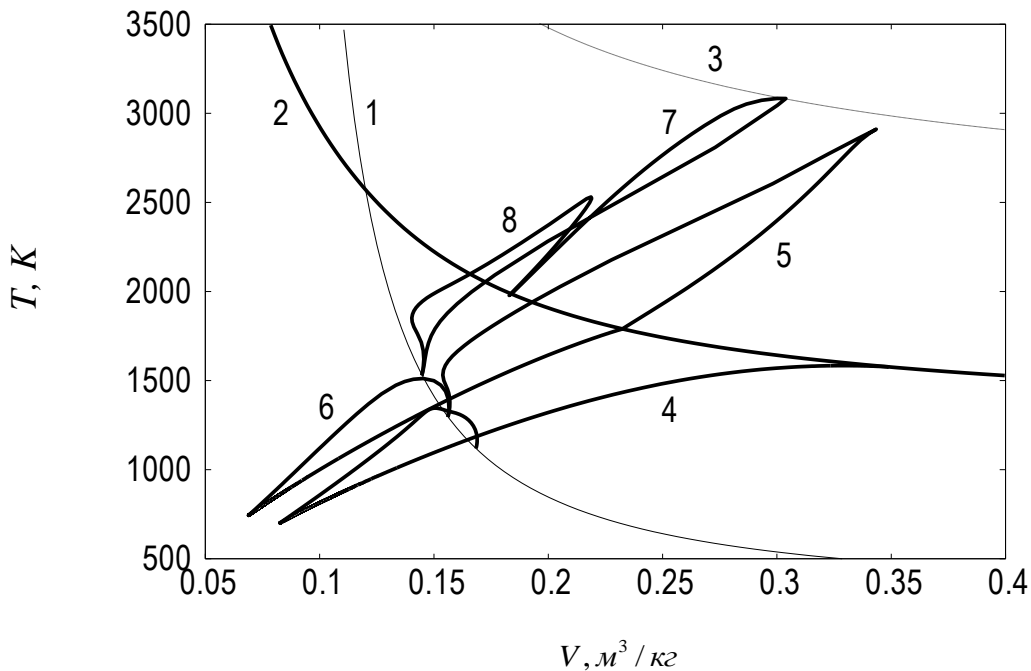


Рис. 3.40. V - T диаграмма (вода/топливо=0.4). 1- ударная адиабата; 2 – детонационная адиабата; 3 – детонационная адиабата, соответствующая отсутствию капель воды; 4 – $D=1436$ м/с – минимальная скорость при которой существует решение ($d=50$ мкм); 5 - $D=1600$ м/с, $d=50$ мкм; 6 – $D=1600$ м/с, $d=10$ мкм; 7 - $D=1800$ м/с, $d=50$ мкм, 8 - $D=1800$ м/с, $d=10$ мкм

3.2 Математическое моделирование метанола-воздушной газочапельной горючей смеси

Также было проведено численное моделирование структуры стационарной детонационной волны в двухфазной горючей смеси метанола с воздухом. Для моделирования химических превращений использовалось 56 обратимых реакций (Таблица 3.3) [226]. Варьировались начальный диаметр капель метанола в диапазоне от 5 до 50 мкм и отношение массы капель к массе воздуха от 5 до 50%.

Таблица 3.3. Реакции для смеси метанола с воздухом

Реакция			Коэффициенты ф-лы Аррениуса		
			A	n	E/R
CH ₃ O + M	<=>	CH ₃ + OH + M	3.162E+12	0.00	3.349E+05
CH ₃ O + O ₂	<=>	CH ₂ O + HO ₂	3.981E+07	0.00	2.131E+05
CH ₃ O + OH	<=>	CH ₂ O + H ₂ O	3.981E+06	0.00	8.373E+03
CH ₃ O + O	<=>	CH ₂ O + OH	1.585E+06	0.00	9.629E+03
CH ₃ O + H	<=>	CH ₂ O + H ₂	3.162E+07	0.00	2.931E+04
CH ₃ O + H	<=>	CH ₃ + H ₂ O	5.012E+06	0.00	2.219E+04
CH ₃ O + CH ₃	<=>	CH ₂ O + CH ₄	1.995E+05	0.00	4.103E+04
CH ₃ O + HO ₂	<=>	CH ₂ O + H ₂ O ₂	6.310E+06	0.00	8.122E+04
CH ₂ O + M	<=>	CH ₂ O + H + M	2.512E+07	0.00	1.214E+05
CH ₂ O + O ₂	<=>	CH ₂ O + HO ₂	1.000E+06	0.00	2.512E+04
CH ₄ + M	<=>	CH ₃ + H + M	1.259E+11	0.00	3.701E+05
CH ₄ + H	<=>	CH ₃ + H ₂	1.259E+08	0.00	4.982E+04
CH ₄ + OH	<=>	CH ₃ + H ₂ O	3.162E-03	3.08	8.373E+03
CH ₄ + O	<=>	CH ₃ + OH	1.585E+07	0.00	3.852E+04
CH ₄ + HO ₂	<=>	CH ₃ + H ₂ O ₂	1.995E+07	0.00	7.536E+04
CH ₃ + HO ₂	<=>	CH ₃ O + OH	1.585E+07	0.00	0.00
CH ₃ + OH	<=>	CH ₂ O + H ₂	3.981E+06	0.00	0.00
CH ₃ + O	<=>	CH ₂ O + H	1.259E+08	0.00	8.373E+03

Таблица 3.3 (продолжение)

Реакция			Коэффициенты ф-лы Аррениуса		
			A	n	E/R
CH ₃ + O ₂	<=>	CH ₃ O + O	2.512E+07	0.00	1.214E+05
CH ₂ O + CH ₃	<=>	CH ₄ + HCO	1.000E+04	0.500	2.512E+04
CH ₃ + HCO	<=>	CH ₄ + CO	3.162E+05	0.500	0.00
CH ₃ + HO ₂	<=>	CH ₄ + O ₂	1.000E+06	0.00	1.675E+03
CH ₃ O + M	<=>	CH ₂ O + H + M	5.012E+07	0.00	8.792E+04
CH ₃ O + O ₂	<=>	CH ₂ O + HO ₂	1.000E+06	0.00	2.512E+04
CH ₂ O + M	<=>	HCO + H + M	5.012E+10	0.00	3.014E+05
CH ₂ O + OH	<=>	HCO + H ₂ O	5.012E+08	0.00	2.637E+04
CH ₂ O + H	<=>	HCO + H ₂	3.981E+06	0.00	1.591E+04
CH ₂ O + O	<=>	HCO + OH	5.012E+07	0.00	1.926E+04
CH ₂ O + HO ₂	<=>	HCO + H ₂ O ₂	1.000E+06	0.00	3.349E+04
HCO + OH	<=>	CO + H ₂ O	1.000E+08	0.00	0.00
HCO + M	<=>	H + CO + M	1.585E+08	0.00	7.954E+04
HCO + H	<=>	CO + H ₂	1.995E+08	0.00	0.00
HCO + O	<=>	CO + OH	1.000E+08	0.00	0.00
HCO + HO ₂	<=>	CH ₂ O + O ₂	1.000E+08	0.00	1.256E+04
HCO + O ₂	<=>	CO + HO ₂	3.162E+06	0.00	2.931E+04
CO + OH	<=>	CO ₂ + H	12.6	1.30	-3.349E+03
CO + HO ₂	<=>	CO ₂ + OH	1.000E+08	0.00	9.629E+04
CO + O + M	<=>	CO ₂ + M	6.310E+03	0.00	1.716E+04
CO ₂ + O	<=>	CO + O ₂	2.512E+06	0.00	1.834E+05
H + O ₂	<=>	O + OH	1.995E+08	0.00	7.033E+04
H ₂ + O	<=>	H + OH	1.995E+04	1.00	3.726E+04
H ₂ O + O	<=>	OH + OH	3.162E+07	0.00	7.703E+04
H ₂ O + H	<=>	H ₂ + OH	1.000E+08	0.00	8.499E+04
H ₂ O ₂ + OH	<=>	H ₂ O + HO ₂	1.000E+07	0.00	7.536E+03

Таблица 3.3 (продолжение)					
Реакция			Коэффициенты ф-лы Аррениуса		
			A	n	E/R
H ₂ O + M	<=>	H + OH + M	1.995E+10	0.00	4.400E+05
H + O ₂ + M	<=>	HO ₂ + M	1.585E+03	0.00	-4.187E+03
HO ₂ + O	<=>	OH + O ₂	5.012E+07	0.00	4.187E+03
HO ₂ + H	<=>	OH + OH	2.512E+08	0.00	7.954E+03
HO ₂ + H	<=>	H ₂ + O ₂	2.512E+07	0.00	2.931E+03
HO ₂ + OH	<=>	H ₂ O + O ₂	5.012E+07	0.00	4.187E+03
H ₂ O ₂ + O ₂	<=>	HO ₂ + HO ₂	3.981E+07	0.00	1.783E+05
H ₂ O ₂ + M	<=>	OH + OH + M	1.259E+11	0.00	1.905E+05
H ₂ O ₂ + H	<=>	HO ₂ + H ₂	1.585E+06	0.00	1.591E+04
O + H + M	<=>	OH + M	1.000E+04	0.00	0.00
O ₂ + M	<=>	O + O + M	5.012E+09	0.00	4.814E+05
H ₂ + M	<=>	H + H + M	1.995E+08	0.00	4.019E+05

На рис. 3.41 представлены распределения параметров в стационарной ДВ при различных числах Маха. При числах Маха менее 3.3 решение системы (2.26-2.34) существует, но воспламенение горючей смеси отсутствует. При числах Маха 3.5–4.5 решение системы (2.26-2.34) отсутствует, кривые относительной скорости газа и скорости звука сходятся. При числах Маха более 4.7 решение системы (2.26-2.34) существует, воспламенение горючей смеси происходит. Минимальное число Маха, при котором образуется ДВ, равно 4.673, что соответствует скорости УВ $D \approx 1620$ м/с.

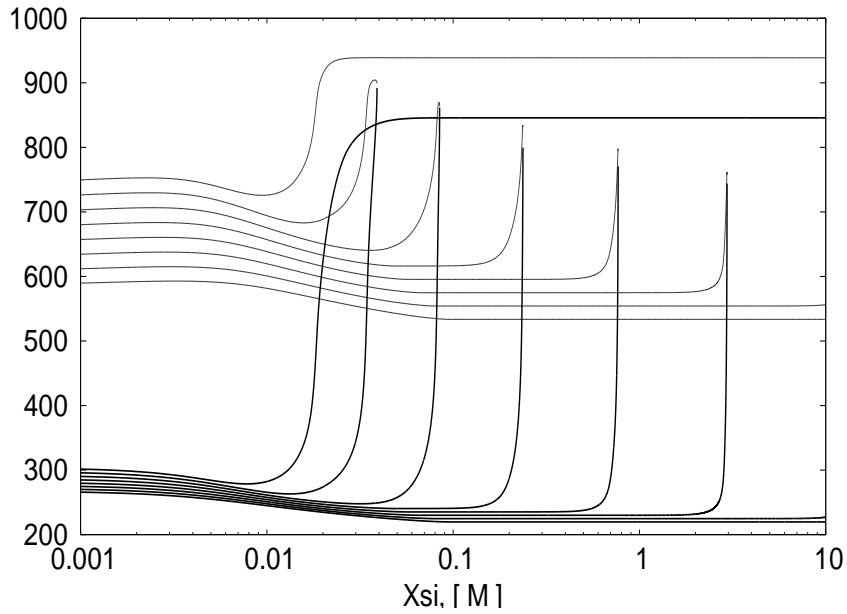
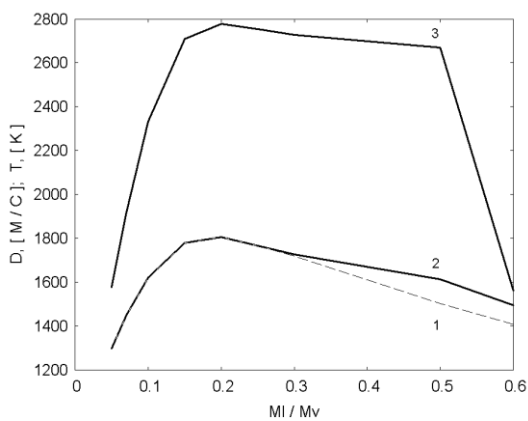
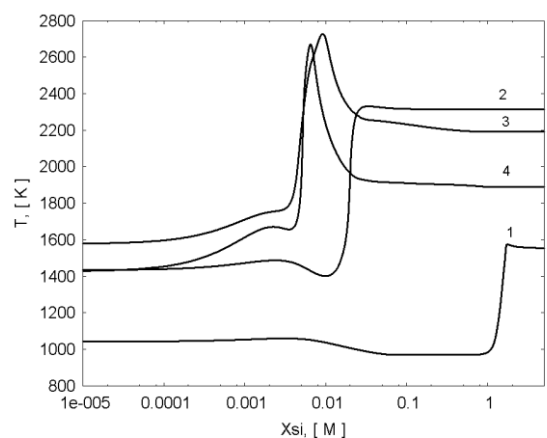


Рис. 3.41. Распределения относительной скорости газа (сплошная кривая) и скорости звука (пунктирная кривая) при числах Маха ударной волны 3.3, 3.5, 3.7, 3.9, 4.1, 4.3, 4.5, 4.7. $0.79N_2 + 0.21O_2$ + капли метанола (CH_3OH) диаметром 10 мкм. Масса капель равна 10% от массы газа

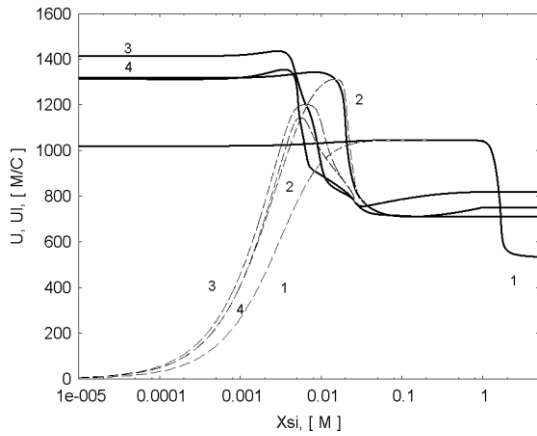
Исследовалось влияние отношения массы капель метанола к массе воздуха на минимальную скорость ДВ. Зависимость минимальной скорости ДВ (кривая 2) и максимальной температуры (кривая 3) представлено на рис. 3.42. Кривая (1) соответствует скорости равновесной детонации Чепмена – Жуге, рассчитанной из системы уравнений (2.39-2.42).



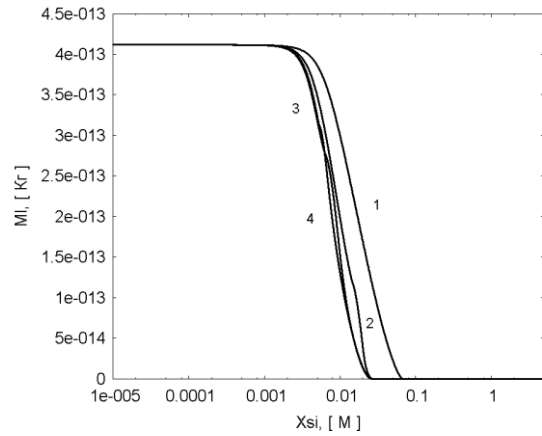
(a)



(б)



(в)



(г)

Рис. 3.42. Параметры детонации Чепмена-Жуге в смеси $0.79N_2 + 0.21O_2$ + капли метанола (CH_3OH) диаметром 10 мкм; (а) – скорость детонации Чепмена-Жуге (газофазная) – кривая 1, минимальная скорость ДВ (газокапельная смесь) – кривая 2, максимальная достигаемая температура – 2, в зависимости от отношения массы капель к массе воздуха; (б) – распределение температуры, (в) – скорость газа – сплошная кривая и капель – пунктирная, (г) – масса капли; 1 - $M_l/M_v = 0.05$, 2 - $M_l/M_v = 0.1$, 3 - $M_l/M_v = 0.3$, 4 - $M_l/M_v = 0.5$

Минимальная скорость ДВ в газокапельной среде до массовых долей жидкой фазы $M_l/M_v \approx 0.3$ практически совпадает со скоростью детонации Чепмена-Жуге, определенной в результате равновесного расчета (рис. 3.42а). В первом рассмотренном случае с испарением капель воды указанные скорости отличались уже при $M_l/M_v = 0.02$. При $M_l/M_v > 0.3$ кинетика испарения и механизм химических превращений оказывают существенное влияние на минимальную скорость ДВ и она начинает превышать равновесную скорость детонации.

Необходимо отметить, что стехиометрическое соотношение $M_l/M_v \approx 0.154$, а максимальные значения скорости и температуры ДВ достигаются при $M_l/M_v \approx 0.2$. Это связано с неравновесным протеканием химических реакций и процесса испарения капель метанола. На рисунках 3.42б - 3.42г представлены изменения характерных параметров течения в ДВ при различных массовых долях метанола.

Цифрой 1 помечены графики с недостаточным количеством горючего $M_l/M_v = 0.05$; процесс воспламенения начинается после полного испарения капель (рис. 3.42б, 3.42г), при этом в процессе испарения температура падает до 900 К (рис. 3.42б); расстояние от ударной волны, на котором происходит воспламенение, равно 140 см (рис. 8б); скорость газа в волне воспламенения падает (рис. 3.42в), температура после воспламенения практически не изменяется и остается на уровне 1550 К. При $M_l/M_v = 0.1$ точки воспламенения горючей смеси и полного испарения капель горючего практически совпадают. Наиболее интенсивному испарению капель соответствует участок снижения температуры газовой фазы, предшествующий воспламенению (рис. 3.42б). При $M_l/M_v = 0.3-0.4$, воспламенение горючей смеси происходит, тогда когда капли горючего еще полностью не испарились (рис. 3.42б, 3.42г), кислород, содержащийся в газовой фазе, при этом, полностью расходуется, так как соотношение горючее-окислитель выше стехиометрического. Соответственно, после роста температуры в волне воспламенения следует ее спад, связанный с испарением капель в среду где уже нет молекул окислителя (рис. 3.42б).

Рассмотрим поведение решения на фазовой плоскости $V-T$. При $M_l/M_v = 0.1$ и начальном диаметре капель 10 мкм скорость детонации Чепмена-Жуге составляет 1619.8 м/с (кривая 1, рис. 3.43, 3.44). Температура за ударной волной составляет 1400 К (рис. 3.44); в начале наблюдается небольшой рост температуры из-за сопротивления капель газовому потоку, потом ее уменьшение, связанное с интенсивным испарением капель, затем устойчивый рост температуры из-за экзотермических реакций, между продуктами испарения метанола и кислородом, входящим в состав воздуха (в случае пересжатой детонации, кривые 2, 3 рис. 3.43, снижения температуры не происходит). Процесс заканчивается достижением системой состояния термодинамического равновесия – точки на равновесной детонационной адиабате.

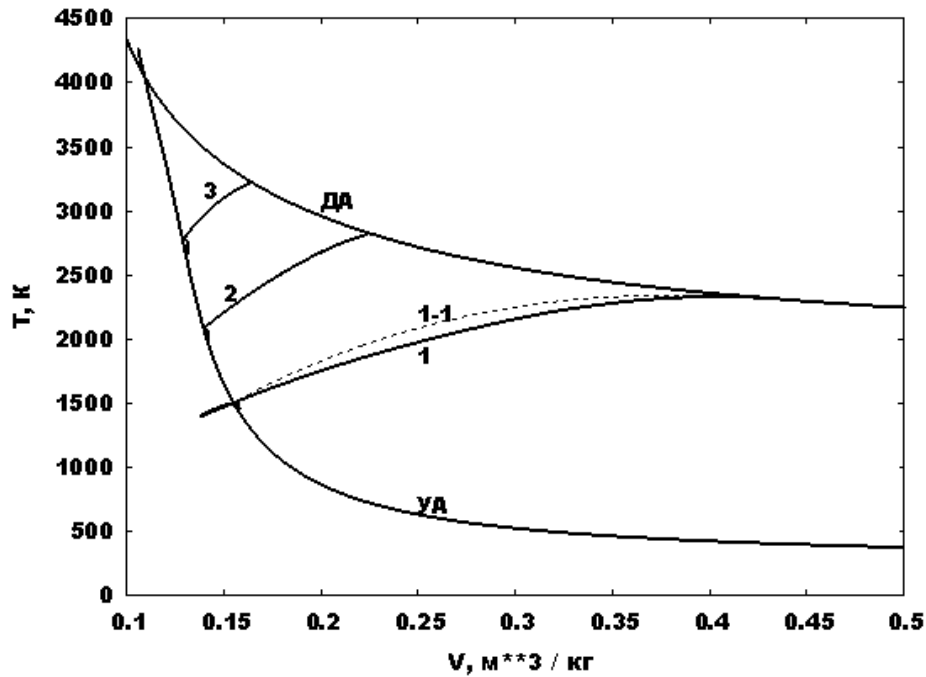


Рис. 3.43. V - T диаграмма (вода/топливо=0.1, $d=10$ мкм, $P=1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА –детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 – неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D= 1619.8$ м/с – минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D= 2000$ м/с; 3 – $D= 2400$ м/с

Для выявления влияния кинетического механизма на параметры течения были проведены расчеты, в которых предполагалось, что неравновесным является только процесс испарения, а химические реакции в газовой фазе протекают равновесно (кривая 1-1 рис. 3.43 - 3.48). Необходимо отметить, что если численное моделирование проводится корректно и константы скоростей обратных химических реакций рассчитываются через скорости прямых реакций с использованием констант равновесия, то начала и концы фазовых траекторий в равновесных и неравновесных расчетах совпадают (рис. 3.43 - 3.48). Из рисунков видно, что при повышенных температурах и вблизи стехиометрии равновесные и неравновесные фазовые траектории близки ($M_l/M_v = 0.1-0.2$, рис. 3.43 - 3.46) и могут отличаться при понижении температуры или удалении от стехиометрии ($M_l/M_v = 0.3$, рис. 3.47, 3.48).

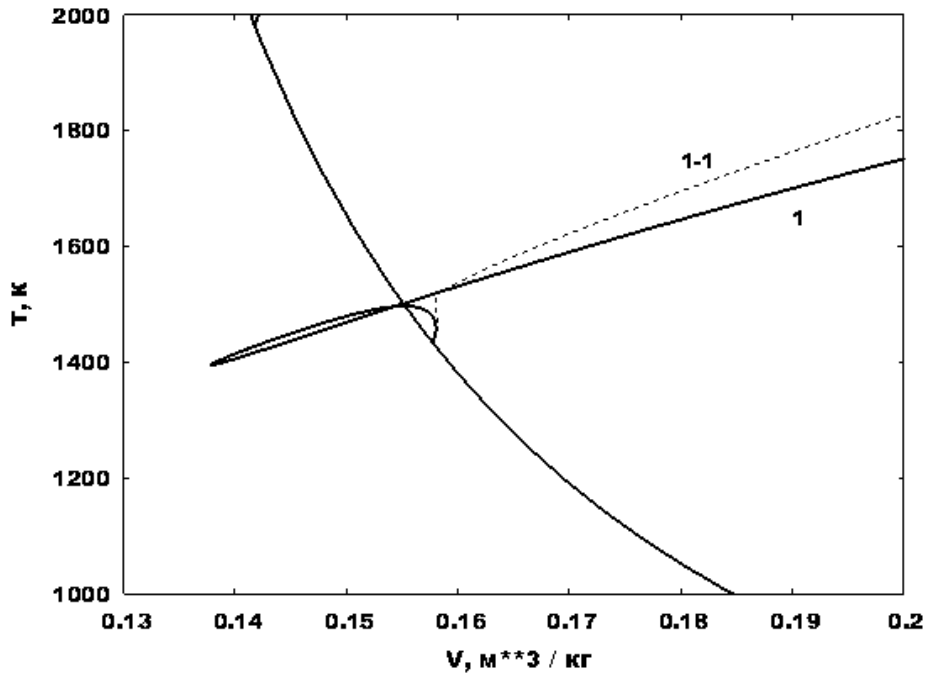


Рис. 3.44. V - T диаграмма (вода/топливо=0.1, $d=10$ мкм, $P=1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА - детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 - неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D=1619.8$ м/с - минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D=2000$ м/с; 3 - $D=2400$ м/с.

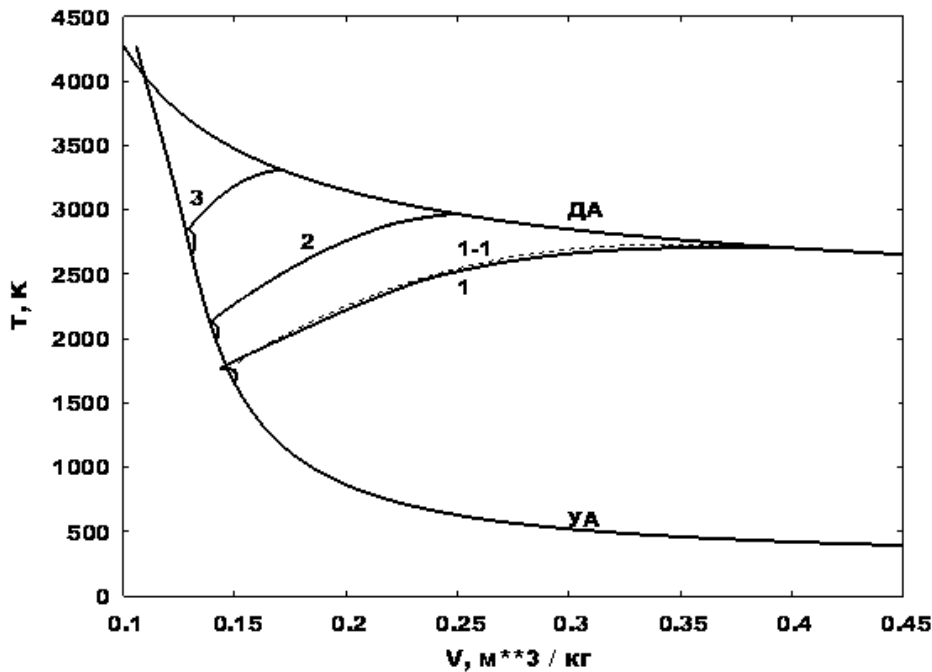


Рис. 3.45. V - T диаграмма (вода/топливо=0.15, $d=10$ мкм, $P=1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА - детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 - неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D=1780$ м/с - минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D=2000$ м/с; 3 - $D=2400$ м/с

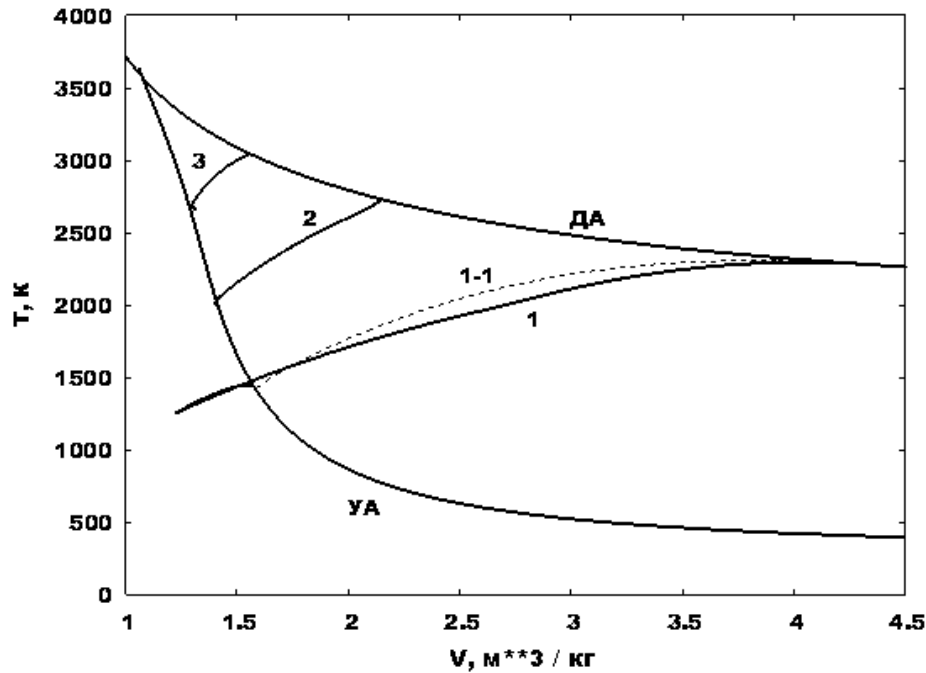


Рис. 3.46. V - T диаграмма (вода/топливо=0.1, $d=10$ мкм, $P=0.1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА - детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 - неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D=1608.5$ м/с - минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D=2000$ м/с; 3 - $D=2400$ м/с

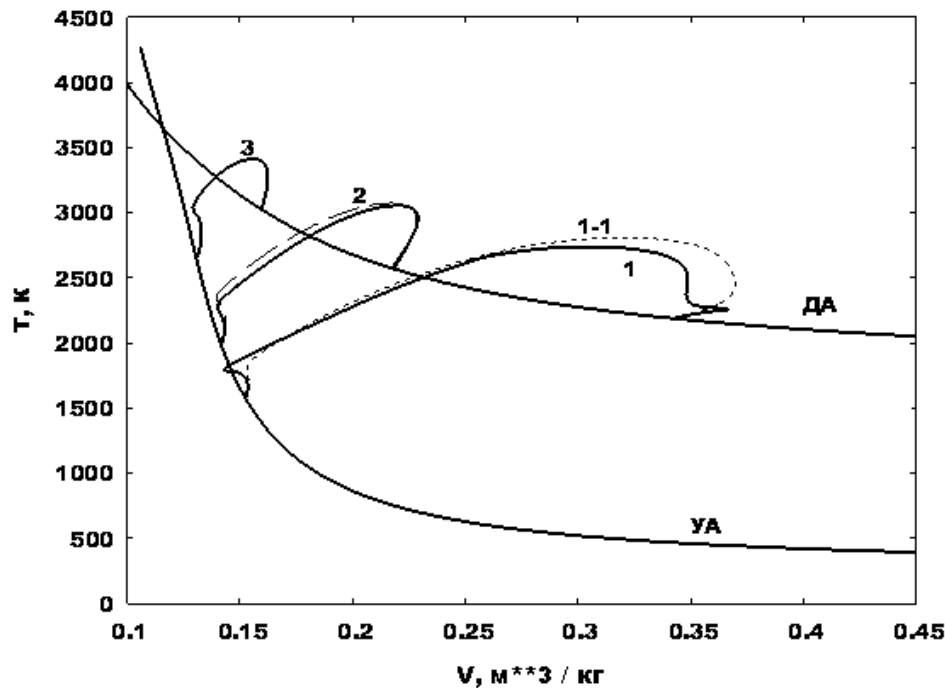


Рис. 3.47. V - T диаграмма (вода/топливо=0.3, $d=10$ мкм, $P=1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА - детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 - неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D=1725.6$ м/с - минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D=2000$ м/с, тонкая линия $d=50$ мкм.; 3 - $D=2400$ м/с

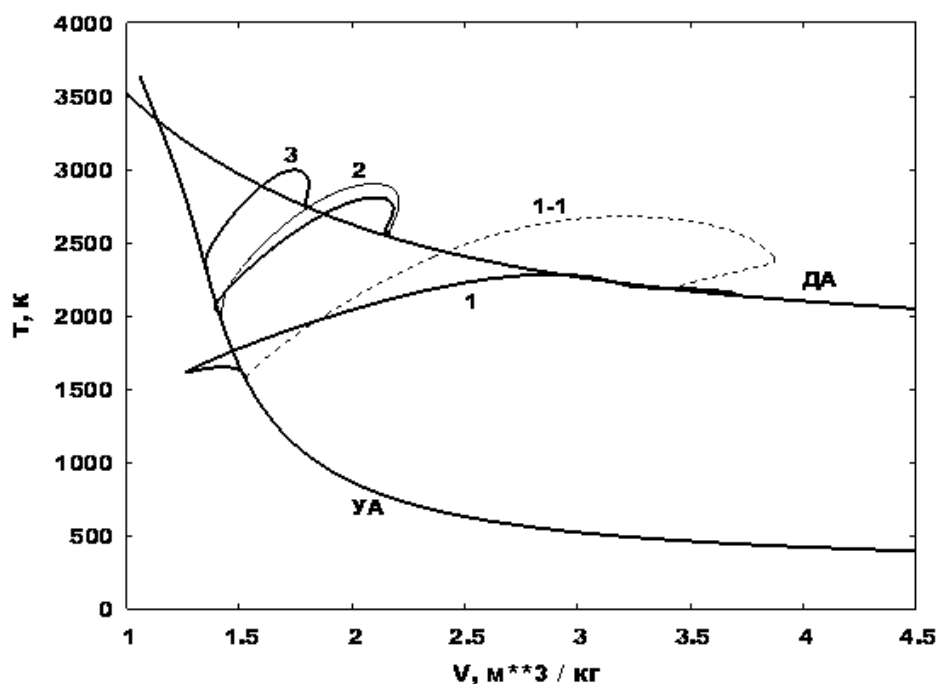


Рис. 3.48. V - T диаграмма (вода/топливо=0.3, $d=10$ мкм, $P=0.1$ атм.). УА - ударная адиабата, ДА - детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 - неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D= 1717.1$ м/с - минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D= 2000$ м/с, тонкая линия $d=50$ мкм; 3 - $D= 2200$ м/с

Для изучения влияния исходной массовой доли m_l/m_v и диаметра капель d_l , на структуру ДВ с минимальной скоростью, была проведена серия расчетов, по интегрированию системы (2.26-2.34), результаты которой представлены в Таблице 3.4. В таблице используются следующие обозначения: M , D - число Маха и скорость ДВ, соответственно, ниже которых существует область где система (2.26-2.34) решения не имеет; ξ_B , t_B - расстояние от УВ и лабораторное время, соответственно, на котором происходит воспламенение горючей смеси; T_{MAX} - максимальное значение температуры, достигаемое в волне воспламенения; ξ_{II} - расстояние от УВ, на котором происходит полное испарение капель метанола; $D_{чж}$ - скорость равновесной детонации Чепмена-Жуге, соответствующая массовому содержанию жидкой фазы перед ударной волной.

Таблица 3.4. Результаты расчетов

№	M_l / M_v	d_l , МКМ	M	D, м/с	ξ_B , м	t_B , МКС	T_{MAX}	ξ_{II} , м	$D_{чж}$, м/с
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
<i>P = 1 атм.</i>									
1	0.05	5	3.740	1296.5	1.484	1133.0	1577.	0.019	1296.5
2	0.05	10	3.740	1296.5	1.484	1153.0	1577.	0.067	
3	0.05	30	3.740	1296.6	1.460	1120.0	1576.	0.496	
4	0.05	50	3.740	1296.5	1.420	1098.0	1576.	1.140	
5	0.07	10	4.185	1450.5	0.139	99.2	1920.	0.047	1450.5
6	0.1	1	4.673	1619.7	0.020	12.2	2332.	0.001	1619.6
7	0.1	5	4.673	1619.7	0.018	10.6	2332.	0.010	
8	0.1	10	4.673	1619.8	0.019	12.1	2332.	0.026	
9	0.1	30	4.673	1619.8	0.051	31.6	2337.	0.168	
10	0.1	50	4.673	1619.7	0.110	72.8	2340.	0.417	
11	0.1	100	4.673	1619.7	0.342	208.0	2342.	1.381	
12	0.15	10	5.135	1780.0	0.007	4.0	2710.	0.023	1780.0
13	0.2	10	5.211	1806.3	0.005	3.0	2779.	0.023	1806.2
14	0.25	10	5.097	1766.8	0.005	2.9	2754.	0.025	1766.2
15	0.3	5	4.972	1723.3	0.003	1.8	2438.	0.007	1717.5
16	0.3	10	4.978	1725.5	0.005	2.8	2727.	0.026	
17	0.3	30	4.971	1723.2	0.023	13.0	2783.	0.180	
18	0.3	50	4.970	1722.9	0.050	28.0	2800.	0.470	
19	0.5	5	4.509	1563.1	0.226	143.0	1713.	0.009	1501.4
20	0.5	10	4.657	1614.1	0.005	3.2	2670.	0.026	
21	0.5	30	4.652	1612.7	0.019	11.8	2764.	0.175	
Таблица 3.4 (продолжение)									
22	0.5	50	4.646	1610.5	0.040	24.5	2781.	0.435	
23	0.6	10	4.315	1495.6	0.690	463.0	1560.	0.036	1406.4
<i>P = 0.1 атм.</i>									
24	0.05	10	3.7399	1296.4	14.4639	11033	1574.67	0.08649	1296.36
25	0.1	10	4.6403	1608.5	0.1677	105.04	2295.42.	0.05483	1608.42
26	0.15	10	5.029	1743.3	0.0290	16.771	2582.62.	0.03796	1743.24
27	0.3	10	4.978	1723.7	0.0221	13.240	2281.44.	0.03985	1715.35
<i>P = 3 атм.</i>									
28	0.05	10	3.7405	1296.6	0.5388	441.345	1573.18	0.04639	1296.52
29	0.1	10	4.6816	1622.8	0.0094	5.4727	2339.6	0.01308	1622.73
30	0.15	10	5.1769	1794.5	0.0038	2.1626	2770.77	0.01139	1794.48
31	0.3	10	4.9862	1728.4	0.0023	1.3682	2800	0.01308	1717.99

Из анализа таблицы 3.4 можно сделать следующие выводы:

- во-первых, расстояние, на котором капли полностью испаряются, увеличивается, что и следовало ожидать, с ростом диаметра капель;

- во-вторых – имеется зависимость расстояния до точки воспламенения от диаметра капель при фиксированной массовой доле жидкой фазы. Оно имеет точку минимума при малых размерах капель (строка 6, табл. 3.4), что связано с более быстрым понижением температуры смеси при испарении капель меньшего диаметра);

- в-третьих – расстояние до точки воспламенения имеет пологий минимум (строки 2, 5, 8, 12-14, 16, 20, 23 табл. 3.4) при повышении массовой доли капель фиксированного диаметра, но оно быстро увеличивается при снижении скорости ДВ

- в - четвертых, как уже отмечалось выше, минимальная скорость ДВ близка к равновесной скорости детонации Чепмена-Жуге вплоть до $M_l / M_v = 0.3$.

3.3 Выводы к Главе 3

1. Разработана физико-математическая модель, вычислительные алгоритмы и комплекс программ, позволяющие моделировать структуру стационарной детонационной волны в горючих газовых и газо-капельных смесях.

2. Расчетным путем определены распределения параметров течения за стационарной ударной волной в горючих смесях водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух при добавлении диспергированной воды.

3. Расчетным путем определены распределения параметров течения за стационарной ударной волной в газочапельной смеси метанола с воздухом.

4. Расчетным путем определены зависимости минимальных скоростей ДВ, распространяющейся в вышеперечисленных смесях при стандартных условиях, от диаметра капель и массовой доли жидкой фазы.

Глава 4. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси

Изучению процесса распространения детонации в газочапельных горючих средах посвящено большое количество статей и монографий, в которых приводятся результаты, как экспериментальных, так и расчетно - теоретических исследований. Это связано с тем, что в настоящее время разрабатывается ряд энергетических и технологических установок, в которых используется детонационное сжигание топлива, а также с обеспечением взрывобезопасности на промышленных объектах. К образованию детонационных волн в смесях, состоящих из распыленного углеводородного горючего и газообразного окислителя, приводят газофазные самоускоряющиеся экзотермические химические реакции между продуктами испарения горючего и окислителем. В результате химических превращений давление и температура смеси повышается, возникают волны сжатия, которые, взаимодействуя между собой, приводят к образованию волны детонации. Для численного моделирования, инициирования и распространения детонационных волн в каналах с пологими стенками можно использовать квазиодномерное приближение, при этом, в случае высокоскоростных течений, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии можно учитывать только при взаимодействии между газовой и дисперсной фазами.

Особенностью моделирования процессов с участием тяжелого углеводородного топлива (керосин, бензин и дизельное топливо), является то, что оно не является моновеществом и состоит из большого числа углеводородов, каждый из которых характеризуется определенным набором теплофизических свойств. Детальный расчет процесса испарения капли углеводородного горючего в окислительную среду, до сих пор можно считать не до конца решенной задачей, которой занимаются группы ученых по всему миру. Ряд практически важных может быть рассмотрен в рамках механики сплошных сред, в соответствии с

которой в каждой ячейке пространства присутствует большое число капель, причем объемной долей капель по сравнению с газом можно пренебречь. При этом вещества, входящие в состав капли, описываются как “псевдовещество”, свойства которого подбираются из согласования с экспериментальными данными, по измерению температуры капли, длин и времен испарения, потоку тепла, которое передается газу при сгорании, теплоты испарения, переносным свойствам и др. При этом, для построения замкнутых физико-математических моделей используемая модель капли и продукты ее испарения должны удовлетворять фундаментальным законам сохранения и термодинамики.

В работе предлагается вариант замкнутой термодинамически согласованной модели испарения и горения капель тяжелого углеводородного горючего в высокоскоростном газовом потоке. Приводится методика восстановления термодинамических свойств “псевдовещества”, моделирующего углеводородное горючее. Приводятся результаты моделирования детонации газокапельных смесей керосина с воздухом.

4.1. Теплофизические свойства углеводородных топлив (методика восстановления термодинамических свойств)

Для моделирования углеводородного горючего в работе использовалось “брутто-вещество” с условной формулой C_xH_y (бензин - $C_{8.12}H_{16.53}$, керосин - $C_{9.32}H_{18.2}$, дизельное топливо - $C_{12.33}H_{22.1}$), теплофизические свойства которого в жидком и газообразном состоянии определялись на основе справочных данных по свойствам углеводородного топлива [98, 223, 227-231].

В таблице 4.1 приведены некоторые свойства углеводородных топлив, заимствованные из справочников [98, 223, 227-231]. На их основе может быть

разработана методика взаимосогласованного восстановления теплофизических свойств углеводородных топлив, как в жидком, так и в газообразном состояниях.

Необходимо отметить, что теплофизические свойства сильно зависят от марки используемого топлива. Продукты испарения топлив представляют из себя смесь сложного состава. В настоящей работе для их описания используется “псевдовещество”, имеющее условную формулу, совпадающую с условной формулой горючего. Остальные свойства “псевдовещества” восстанавливаются с использованием данных, аналогичных приведенным в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Физико-химические свойства углеводородных топлив

		Бензин	Керосин	Дизельное топливо
1	Условная формула	C8.12H16.53	C9.32H18.2	C12.33H22.1
2	Молекулярная масса [Кг/кмоль]	114,0	130,0	170,0
3	Энтальпия образования жидкости [КДж/моль]	-222,2	-253,4	-331,3
4	Температура кипения, T_k [К]	373	473	523
5	Критическая температура, $T_{кр}$ [К]	543	633	678
6	Плотность жидкости, [Kz / m^3]	751-1.0056(T-293)	819-0.804(T-293)	850-0.695(T-293)
7	Давление насыщенных паров $Lg(P)$, [Па]	9.22-1540/T	9.19-1900/T	9.18-2050/T
8	Теплота испарения [КДж/кг], l_s	$l = l_s ((1 - T/T_{кр}) / (1 - T_k/T_{кр}))^{0.4}$		
		315,0	267,5	210,0
9	Теплоемкость жидкости, [Дж/кг/К]	2061.5+5.47(T-293)	2003.0+5.05(T-293)	1988.0+5.0(T-293)
10	Теплоемкость газообразного горючего, [Дж/кг/К]	1955+2.5(T-293)	2055+2.1(T-293)	2100+2.0(T-293)

Таблица 4.1 (продолжение)				
		Бензин	Керосин	Дизельное топливо
11	Вязкость газовой фазы, η [Па/с]	$\eta = \eta_0 (T/T_0)^n, T_0 = 273 \text{ K}$		
	η_0	2.73e-6	3.84e-6	4.0e-6
	n	1.98	1.74	1.7
12	Теплопроводность газовой фазы, λ [Вт/м/К]	$\lambda = \lambda_0 (T/T_0)^n, T_0 = 273 \text{ K}$		
	λ_0	0.0139	0.00855	
	n	1.48	2.13	
13	Коэффициент диффузии паров в воздухе, D [$\text{м}^2/\text{с}$]	$D = D_0 P/P_0 (T/T_0)^m, P_0 = 101325 \text{ Па}, T_0 = 273 \text{ K}$		
	D_0	8.45e-6	5.01e-6	7.3e-6
	m	2	2	2

Приведенные в таблице 4.1 данные позволяют разработать методику взаимосогласованного восстановления теплофизических свойств углеводородных топлив как в жидком, так и в газообразном состояниях.

Опишем методику восстановления теплофизических свойств.

При задании термодинамических свойств веществ, как газообразных, так и жидких, используется единая форма описания. По имеющимся термодинамическим данным восстанавливаются выражения для потенциалов Гиббса газообразных и жидких компонентов, соответственно и их смесей. Считается, что все газы находятся в идеальном газе состоянии, а свойства жидкостей зависят от температуры и давления. Все остальные термодинамические величины рассчитываются путем дифференцирования выражения для потенциала. Для газообразных компонентов, как правило, используются аппроксимации, в двух диапазонах температур - от 300 К до 1000 К, и от 1000 К до 6000 К. При температурах ниже 300 К и выше 6000 К, теплоемкости считаются постоянными и равными соответствующим значениям

при 300 К и 6000 К, все остальные термодинамические величины рассчитываются с учетом этого предположения. Такой способ задания термодинамических свойств гарантирует выполнение всех термодинамических законов и тождеств и позволяет построить универсальные, всегда сходящиеся, алгоритмы решения характерных задач.

При описании углеводородного горючего не учитывается его фракционный состав, его свойства описываются брутто зависимостями, такими как зависимости от температуры теплоемкости, кривой насыщения и т.д. По этим данным восстанавливается потенциал Гиббса “псевдовещества”, каким является углеводородное горючее, причем как в жидком, так и в газообразном, если это необходимо, состояниях.

Для расчета теплофизических свойств газообразного вещества в идеальном газом состоянии достаточно знать: энтальпию образования вещества - $\Delta_f H^0(298.15)$, стандартную энтропию - $S_0(298.15)$, зависимость теплоемкости от температуры: $C_p(T)$ и уравнение состояния, связывающее давление, температуру и молярный объем: $PV = RT$. По этим данным можно восстановить выражение для потенциала Гиббса вещества, которого достаточно для вычисления произвольных термодинамических свойств.

$$G_V(P, T) = \Delta_f H_V^0(T_0) - T_0 S_V(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T C_{p,V} dT - (T - T_0) S_V^0(P_0, T_0) - T \int_{T_0}^T \frac{C_{p,V}}{T} dT + RT \ln\left(\frac{P}{P_0}\right), \quad (4.1)$$

здесь R - универсальная газовая постоянная, $P_0 = 101325 \text{ Па}$ - стандартное давление, $T_0 = 298,15 \text{ К}$ - стандартная температура. Аналогично для жидкости, если предположить, что объемом, занимаемым жидкой фазой, можно пренебречь справедливо выражение для потенциала Гиббса:

$$G_L(T) = \Delta_f H_L^0(T_0) - T_0 S_L(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T C_{p,L} dT - (T - T_0) S_L^0(P_0, T_0) - T \int_{T_0}^T \frac{C_{p,L}}{T} dT. \quad (4.2)$$

Выберем из таблицы 4.1 данные, которые мы считаем наиболее надежными, например:

1. Энтальпию образования жидкой фазы $\Delta_f H_L^0(T_0)$, полиномы для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$ и газа $C_{P,V}(T)$. Тогда энтальпия образования газообразного горючего $\Delta_f H_V^0(T_0)$ может быть определена из равенства:

$$\Delta_f H_V^0(T_0) + \int_{T_0}^{T_K} C_{P,V} dT = \Delta_f H_L^0(T_0) + \int_{T_0}^{T_K} C_{P,L} dT + l(T_K).$$

Разница стандартных энтропий из условия:

$$S_V^0(P_0, T_0) - S_L^0(P_0, T_0) = \int_{T_0}^{T_K} \frac{C_{P,L}}{T} dT - \int_{T_0}^{T_K} \frac{C_{P,V}}{T} dT + \frac{l_S}{T_K}.$$

Для определения абсолютных значений энтропий необходимо дополнительно задать значение стандартной энтропии или жидкой или газовой фаз. Достоверность восстановленных свойств может быть проверена путем сравнения рассчитанных с использованием восстановленных потенциалов Гиббса для жидкой и газообразной фаз, зависимостей теплоты парообразования и кривой насыщения от температуры и соответствующих данных из таблицы 4.1.

2. Энтальпию образования жидкой фазы $\Delta_f H_L^0(T_0)$, полиномы для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$, стандартную энтропию жидкой фазы $S_L^0(P_0, T_0)$ и уравнение для кривой насыщения $\ln\left(\frac{P}{P_0}\right) = f(T)$. Потенциал Гиббса газообразной фазы восстанавливается из условия равенства потенциалов Гиббса фаз на кривой насыщения.

$$G_V(T) = G_L(T) - RT f(T).$$

3. Энтальпию образования жидкой фазы $\Delta_f H_L^0(T_0)$, полином для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$, стандартную энтропию жидкой фазы $S_L^0(P_0, T_0)$, зависимость теплоты парообразования от температуры $l(T)$. Выражение для энтальпии газовой фазы, а следовательно и теплоемкости, восстанавливается из равенства:

$$H_V(T) = \Delta_f H_L^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_{P,L} dT + l(T).$$

Стандартная энтропия газовой фазы из:

$$S_V^0(P_0, T_0) = S_L^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^{T_K} \frac{C_{P,L}}{T} dT - \int_{T_0}^{T_K} \frac{C_{P,V}}{T} dT + \frac{l_S}{T_K}.$$

Необходимо отметить, что данные, содержащиеся в таблице 4.1 весьма противоречивы, например, если мы подставим температуру кипения керосина в кривую насыщения, то получим: $P = 10^{(9.19 - 1900/473)} = 148966$. Должно было получиться 101325 – стандартное давление. Следовательно, приведенная кривая насыщения соответствует другой температуре кипения, а именно: $T_K = 454 \text{ K}$ - вполне реальная температура кипения для керосина.

В справочной литературе [98] приводятся полиномиальные аппроксимационные формулы для приведенного стандартного потенциала Гиббса - $\Phi^0(T)$, который связан с температурной частью потенциала Гиббса $G^0(T)$ по формуле:

$$G^0(T) = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] - T\Phi^0(T), \quad (4.3)$$

где $H^0(0)$ - стандартная энтальпия $H^0(T)$ при абсолютном нуле.

Для задания $\Phi^0(x)$, $x = 10^{-4}T$ применяются полиномы, например, вида [98]:

$$\Phi^0(x) = \varphi_0 + \varphi_{\ln} \ln(x) + \varphi_{-2}x^{-2} + \varphi_{-1}x^{-1} + \varphi_1x + \varphi_2x^2 + \varphi_3x^3, \quad (4.4)$$

здесь φ_i , $i = \ln, -2, \dots, 3$ - числовые коэффициенты, индивидуальные для каждого вещества, которые могут быть рассчитаны, если известны зависимость теплоемкости от температуры и стандартная энтропия. С использованием (4.3) выражения для $S^0(T)$, $C_p(T)$ имеют вид:

$$S^0(T) = \varphi_{\ln} (1 + \ln(x)) - \varphi_{-2}x^{-2} + \varphi_0 + 2\varphi_1x^1 + 3\varphi_2x^2 + 4\varphi_3x^3, \quad (4.5)$$

$$C_p(T) = \varphi_{\ln} + 2\varphi_{-2}x^{-2} + 2\varphi_1x + 6\varphi_2x^2 + 12\varphi_3x^3, \quad (4.6)$$

$$H(T) = \Delta_f H_i^0(T_0) - [H_i^0(T_0) - H_i^0(0)] + 10^4 (x\varphi_{\ln} - 2\varphi_{-2}x^{-1} - \varphi_{-1} + \varphi_1x^2 + 2\varphi_2x^3 + 3\varphi_3x^4) \quad (4.7)$$

Будем восстанавливать свойства дизельного топлива заданного формулой $C_{12.33}H_{22.1}$:

$$m = 12.33 * 12.0107 + 22.1 * 1.008 \text{ Кг/кмоль} = 0.1703687 \text{ Кг/моль}, \quad m = 170.3687 \text{ Кг/кмоль} = \\ = 0.1703687 \text{ Кг/моль}, \quad T_0 = 298.15 \text{ K}, \quad T_{кин} = 523 \text{ K}, \quad T_{кр} = 678 \text{ K}, \quad l_s(T_{кин}) = 210.0 \text{ КДж/кг} =$$

35.7774 КДж/моль, $\Delta_f H_L^0(298.15) = -331.3$ КДж/моль. Полином для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$ находился из табличных данных [229] методом наименьших квадратов.

Если теплоемкость жидкости $C_{P,L}(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2$ КДж/моль/К, то по МНК [229]: $a = 0.13875900 \cdot 25081$, $b = 0.00057553 \cdot 230167025$, $c = 2.85456641 \cdot 25636 \cdot 10^{-7}$.

Теплота парообразования: $l(T) = l_s \cdot \left(\frac{1 - T/T_{кр}}{1 - T_{кип}/T_{кр}} \right)^{0.4}$ КДж/моль, $l(523) = 35.7774$ КДж/моль

, $l(678) = 0$ КДж/моль, следовательно $l(T) = H_v(T) - H_L(T)$ КДж/моль, следовательно $l(523) = H_v(523) - H_L(523)$ КДж/моль, $H_v(678) - H_L(678) = 0$ КДж/моль.

Энтальпия жидкости находится по формуле:

$$H_L(T) = \Delta_f H_L^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_{P,L} dT \text{ КДж/моль,}$$

$H_L(T) = 0.138759 \cdot T + 0.000287 \cdot T^2 + 9.515221 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 - 400.773388$ КДж/моль. Пусть теплоемкость газовой фазы $C_{V,L}(T) = av + bv \cdot T + cv \cdot T^2 + dv \cdot T^3$ КДж/моль/К, где av, bv, cv, dv нам неизвестны.

Энтропия жидкой фазы $S_L(T) = S_L^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,L}}{T} dT$. Зададим стандартную

энтропию жидкой фазы: $S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT$. Пусть стандартная мольная

теплоемкость имеет вид $C_{P,L}^0 = a \cdot T^n, n > 1$, следовательно

$S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT = \int_0^{T_0} \frac{a \cdot T^n}{T} dT = \frac{C_{P,L}^0}{n}, n > 1$. Пусть $n = 2$, тогда $C_{P,L}^0 = a \cdot T^2$. Из

справочных данных $C_{P,L}^0 = 0.490$ ккал/кг * град = 0.3495 КДж/моль, тогда

$S_L^0(T_0) = 0.1748$ КДж/Моль/К. Энтропия газовой фазы: $S_v(T) = S_v^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,V}}{T} dT$.

Потенциал Гиббса жидкой фазы: $G_L(T) = H_L(T) + T \cdot S_L(T)$, потенциал Гиббса

газовой фазы $G_v(T) = H_v(T) + T \cdot S_v(T)$. $G_L(T_{кип}) - G_v(T_{кип}) = R \cdot T \cdot \ln \frac{P_{кип}}{P_0} = 0$,

следовательно $G_L(523) - G_V(523) = 0$. Составим систему уравнений с шестью

$$\text{неизвестными } av, bv, cv, dv, \Delta_f H_V^0(298.15), S_V^0(P_0, T_0) : \begin{cases} H_V(T_{\text{кун}}) - H_L(T_{\text{кун}}) - l(T_{\text{кун}}) = 0 \\ H_V(T_{\text{кр}}) - H_L(T_{\text{кр}}) = 0 \\ G_L(T_{\text{кун}}) - G_V(T_{\text{кун}}) = 0 \\ H_V(T_1) - H_L(T_1) - l(T_1) = 0 \\ H_V(T_2) - H_L(T_2) - l(T_2) = 0 \\ G_L(T_{\text{кр}}) - G_V(T_{\text{кр}}) = \delta \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\begin{cases} \Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_{\text{кун}} - T_0) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_{\text{кун}}^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_{\text{кун}}^4 - T_0^4) - \\ \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_{\text{кун}} - T_0) + \frac{b}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_{\text{кун}}^3 - T_0^3) - l(T_{\text{кун}}) = 0 \\ \Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_{\text{кр}} - T_0) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_{\text{кр}}^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_{\text{кр}}^4 - T_0^4) - \\ - \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_{\text{кр}} - T_0) + \frac{b}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_{\text{кр}}^3 - T_0^3) = 0 \\ \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_{\text{кун}} - T_0) + \frac{b}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_{\text{кун}}^3 - T_0^3) - \\ - T_{\text{кун}}(S_L^0(T_0) + \frac{c}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + a(\ln(T_{\text{кун}}) - \ln(T_0)) + b(T_{\text{кун}} - T_0)) - \\ - [\Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_{\text{кун}} - T_0) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_{\text{кун}}^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_{\text{кун}}^4 - T_0^4) - \\ - T_{\text{кун}}(S_V^0(T_0) + \frac{dv}{3}(T_{\text{кун}}^3 - T_0^3) + \frac{cv}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кун}}^2 - T_0^2) + \\ + av(\ln(T_{\text{кун}}) - \ln(T_0)) + bv(T_{\text{кун}} - T_0))] = 0 \\ \Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_1 - T_0) + \frac{bv}{2}(T_1^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_1^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_1^4 - T_0^4) - \\ - \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_1 - T_0) + \frac{b}{2}(T_1^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_1^3 - T_0^3) - l(T_1) = 0 \\ \Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_2 - T_0) + \frac{bv}{2}(T_2^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_2^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_2^4 - T_0^4) - \\ - \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_2 - T_0) + \frac{b}{2}(T_2^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_2^3 - T_0^3) - l(T_2) = 0 \\ \Delta_f H_L^0(T_0) + a(T_{\text{кр}} - T_0) + \frac{b}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \frac{c}{3}(T_{\text{кр}}^3 - T_0^3) - \\ - T_{\text{кр}}(S_L^0(T_0) + \frac{c}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + a(\ln(T_{\text{кр}}) - \ln(T_0)) + b(T_{\text{кр}} - T_0)) - \\ - [\Delta_f H_V^0(T_0) + av(T_{\text{кр}} - T_0) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \frac{cv}{3}(T_{\text{кр}}^3 - T_0^3) + \frac{dv}{4}(T_{\text{кр}}^4 - T_0^4) - \\ - T_{\text{кр}}(S_V^0(T_0) + \frac{dv}{3}(T_{\text{кр}}^3 - T_0^3) + \frac{cv}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \frac{bv}{2}(T_{\text{кр}}^2 - T_0^2) + \\ + av(\ln(T_{\text{кр}}) - \ln(T_0)) + bv(T_{\text{кр}} - T_0))] = \delta \end{cases} \quad (4.9)$$

Подставим в систему (4.9) следующие известные параметры:

$$a = 0.13875900 \cdot 25081, \quad b = 0.00057553 \cdot 230167025, \quad c = 2.85456641 \cdot 25636 \cdot 10^{-7},$$

$$T_0 = 298.15, \quad T_{\text{кин}} = 523, \quad T_{\text{кр}} = 678, \quad l(T_{\text{кин}}) = 35.7774, \quad \Delta_f H_L^0(298.15) = -331.3,$$

$$S_L^0(T_0) = 0.1748.$$

$$\begin{cases} H_V(523) - H_L(523) - l(523) = 0 \\ H_V(678) - H_L(678) = 0 \\ G_L(523) - G_V(523) = 0 \\ H_V(300) - H_L(300) - l(300) = 0 \\ H_V(400) - H_L(400) - l(400) = 0 \\ G_L(678) - G_V(678) = \delta \end{cases} \quad (4.10)$$

Расчет δ :

$$RT \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + G_V(T_{\text{кр}}) = G_L(T_{\text{кр}}) + \frac{1}{\rho}(P - P_0),$$

$$G_L(T_{\text{кр}}) - G_V(T_{\text{кр}}) = RT_{\text{кр}} \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) - \frac{1}{\rho}(P - P_0) = \delta.$$

$$R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}), \quad \rho = 0.850 \text{ г}/\text{см}^3 = 850 \text{ кг}/\text{м}^3 = 4989.1794 \text{ моль}/\text{м}^3. \quad P_0 = 10^5 \text{ Па}$$

, $P = 3.8554 \cdot 10^5 \text{ Па}$, следовательно $\delta = 7.5496$. Подставляем в (4.10) $\delta = 7.5496$.

Решаем эту систему уравнений, получаем:

$$a_v = 4.248193, \quad b_v = -0.028189, \quad c_v = 0.000065, \quad d_v = -4.818913 \cdot 10^{-8},$$

$$\Delta_f H_V^0(298.15) = -280.239721 \text{ кДж}/\text{моль}, \quad S_V^0(P_0, T_0) = 0.280006 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К} \quad \text{следовательно:}$$

$$C_{V,L}(T) = -0.028189 \cdot T + 0.000065 \cdot T^2 - 4.818913 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 + 4.248193 \text{ кДж}/\text{моль}/\text{К}. \quad \text{Из (4.6)}$$

следует, что $\varphi_{\text{in},L} = 138.759$, $\varphi_{1,L} = 2877.6615$, $\varphi_{2,L} = 4757.6107$, $\varphi_{-2,L} = \varphi_{3,L} = 0$, а

$$\varphi_{\text{in},V} = 4248.1926, \quad \varphi_{1,V} = -140940, \quad \varphi_{2,L} = 1086800, \quad \varphi_{-2,V} = 0, \quad \varphi_{3,V} = -4015800. \quad \text{Из условия}$$

$$H(298.15) = \Delta_f H_L^0(298.15) \quad \text{и} \quad \text{формулы} \quad (4.7) \quad \text{получаем:}$$

$$[H_L^0(298.15) - H_L^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,L} = 69473 \text{ Дж}/\text{моль}, \quad [H_V^0(298.15) - H_V^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,V} = 494590 \text{ Дж}/\text{моль}.$$

Из условий $S_L^0(T_0) = 0.1748 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$, $S_V^0(P_0, T_0) = 0.280006 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$ ($T = 523 \text{ К}$,

$$S_L(P, T) = 0.4085 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}, \quad S_V(P, T) = 0.4769 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}) \quad \text{и} \quad \text{формулы} \quad (4.5)$$

получаем $\varphi_{0,L} = 339.1832$, $\varphi_{0,V} = 16886$

Будем восстанавливать свойства керосина заданного формулой $C_{9,32}H_{18,2}$:
 $m = 9.32 \cdot 12.0107 + 18.2 \cdot 1.008 = 0.130285 \text{ кг/моль}$ $m = 130.285 \text{ кг/кмоль} = 0.130285 \text{ кг/моль}$,
 $T_0 = 298.15 \text{ K}$, $T_{\text{кип}} = 473 \text{ K}$, $T_{\text{кр}} = 633 \text{ K}$, $l_s(T_{\text{кип}}) = 267.5 \text{ КДж/кг} = 34.8513 \text{ КДж/моль}$,
 $\Delta_f H_L^0(298.15) = -253.4 \text{ КДж/моль}$. Полином для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$
находился из табличных данных [229] методом наименьших квадратов.

Если теплоемкость жидкости $C_{P,L}(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2$ КДж/моль/К , то по
МНК [229]: $a = 0.104034$, $b = 0.000463$, $c = 2.392794 \cdot 10^{-7}$. Теплота парообразования:

$$l(T) = l_s \cdot \left(\frac{1 - T/T_{\text{кр}}}{1 - T_{\text{кип}}/T_{\text{кр}}} \right)^{0.4} \text{ КДж/моль} . \quad l(473) = 34.8513 \text{ КДж/моль} , \quad l(633) = 0 \text{ КДж/моль} .$$

$$l(T) = H_v(T) - H_L(T) \text{ КДж/моль} , \quad \text{следовательно} \quad l(473) = H_v(473) - H_L(473) \text{ КДж/моль} ,$$

$$H_v(633) - H_L(633) = 0 \text{ КДж/моль} .$$

Энтальпия жидкости по формуле: $H_L(T) = \Delta_f H_L^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_{P,L} dT \text{ КДж/моль}$,
 $H_L(T) = 0.104034 \cdot T + 0.000231 \cdot T^2 + 7.975978 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 - 307.092473 \text{ КДж/моль}$. Пусть
теплоемкость газовой фазы $C_{V,L}(T) = av + bv \cdot T + cv \cdot T^2 + dv \cdot T^3$ КДж/моль/К , где
 av, bv, cv, dv нам неизвестны.

Энтропия жидкой фазы $S_L(T) = S_L^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,L}}{T} dT$. Зададим стандартную
энтропию жидкой фазы: $S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT$. Пусть стандартная мольная
теплоемкость имеет вид $C_{P,L}^0 = a \cdot T^n, n > 1$, следовательно
 $S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT = \int_0^{T_0} \frac{a \cdot T^n}{T} dT = \frac{C_{P,L}^0}{n}, n > 1$. Пусть $n = 2$, тогда $C_{P,L}^0 = a \cdot T^2$. Из
справочных данных $C_{P,L}^0 = 2.14 \text{ КДж/кг} \cdot \text{К} = 0.2788 \text{ КДж/моль}$, тогда

$$S_L^0(T_0) = 0.1394 \text{ КДж/Моль/К} . \quad \text{Энтропия газовой фазы: } S_V(T) = S_V^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,V}}{T} dT$$

Потенциал Гиббса жидкой фазы: $G_L(T) = H_L(T) + T \cdot S_L(T)$, потенциал Гиббса газовой фазы $G_V(T) = H_V(T) + T \cdot S_V(T)$. $G_L(T_{кин}) - G_V(T_{кин}) = R \cdot T \cdot \ln \frac{P_{кин}}{P_0} = 0$, следовательно $G_L(373) - G_V(373) = 0$

Составим систему уравнений (4.8) с шестью неизвестными $av, bv, cv, dv, \Delta_f H_L^0(298.15), S_V^0(P_0, T_0)$:

Подставим в систему (4.8) следующие известные параметры:

$a = 0.104034$, $b = 0.000463$, $c = 2.392794 \cdot 10^{-7}$, $T_0 = 298.15$, $T_{кин} = 473$, $T_{кр} = 633$, $l_s(T_{кин}) = 34.851$, $\Delta_f H_L^0(298.15) = -253.4$. Расчет δ :

$$RT \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + G_V(T_{кр}) = G_L(T_{кр}) + \frac{1}{\rho}(P - P_0)$$

$$G_L(T_{кр}) - G_V(T_{кр}) = RT_{кр} \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) - \frac{1}{\rho}(P - P_0) = \delta$$

$R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$, $\rho = 0.800 \text{ г}/\text{см}^3 = 800 \text{ кг}/\text{м}^3 = 6140.3704 \text{ моль}/\text{м}^3$. $P_0 = 10^5 \text{ Па}$, $P = 5.1 \cdot 10^5 \text{ Па}$. Следовательно $\delta = 8.5075$. Подставляем в (4.9) $\delta = 8.5075$.

Решаем эту систему уравнений, получаем:

$$av = 4.707186, bv = -0.033054, cv = 0.0000795, dv = -6.193528 \cdot 10^{-8},$$

$$\Delta_f H_V^0(298.15) = -206.69654 \text{ кДж}/\text{моль}, S_V^0(P_0, T_0) = 0.243892 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}, S_L^0(T_0) = 0.1394$$

следовательно:

$$C_{V,L}(T) = -0.033054 \cdot T + 0.0000795 \cdot T^2 - 6.193528 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 + 4.707186 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}. \text{ Из}$$

(4.6) следует, что $\varphi_{ln,L} = 104.0336$, $\varphi_{1,L} = 2312.9862$, $\varphi_{2,L} = 3987.9892$, $\varphi_{-2,L} = \varphi_{3,L} = 0$, а

$$\varphi_{ln,V} = 4707.186, \varphi_{1,V} = -165270, \varphi_{2,L} = 1325000, \varphi_{-2,V} = 0, \varphi_{3,V} = -5161300. \text{ Из условия}$$

$$H(298.15) = \Delta_f H_L^0(298.15) \text{ и формулы (4.7) получаем:}$$

$$[H_L^0(298.15) - H_L^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,L} = 53692 \text{ Дж}/\text{моль}, [H_V^0(298.15) - H_V^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,V} = 514270 \text{ Дж}/\text{моль}.$$

Из условий $S_L^0(T_0) = 0.1394 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$, $S_V^0(P_0, T_0) = 0.243892 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$ ($T = 473 \text{ К}$, $S_L(P, T) = 0.2844 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$, $S_V(P, T) = 0.3587 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$) и формулы (4.5)

получаем $\varphi_{0,L} = 252.2513$, $\varphi_{0,V} = 18941$

Будем восстанавливать свойства бензина заданного формулой $C_{8.12}H_{16.53}$:
 $m = 8.12 * 12.0107 + 16.53 * 1.008 = 0.1141891 \text{ кг/моль}$ $m = 114.1891 \text{ кг/кмоль} = 0.1141891 \text{ кг/моль}$,
 $T_0 = 298.15 \text{ K}$, $T_{кин} = 373 \text{ K}$, $T_{кр} = 543 \text{ K}$, $l_s(T_{кин}) = 315.0 \text{ КДж/кг} = 35.96964 \text{ КДж/моль}$,
 $\Delta_f H_L^0(298.15) = -222.2 \text{ КДж/моль}$. Полином для теплоемкости жидкости $C_{P,L}(T)$
находился из табличных данных [229] методом наименьших квадратов.

Если теплоемкость жидкости $C_{P,L}(T) = a + b * T + c * T^2$ КДж/моль/К , то по
МНК [229]: $a = 0.12774380 \text{ 29264}$, $b = 0.00020517 \text{ 681332451}$, $c = 25.4821435 \text{ 545722} * 10^{-7}$.

Теплота парообразования: $l(T) = l_s \cdot \left(\frac{1 - T/T_{кр}}{1 - T_{кин}/T_{кр}} \right)^{0.4} \text{ КДж/моль}$.

$l(373) = 35.9696 \text{ КДж/моль}$, $l(543) = 0 \text{ КДж/моль}$. $l(T) = H_v(T) - H_L(T) \text{ КДж/моль}$,
следовательно $l(373) = H_v(373) - H_L(373) \text{ КДж/моль}$, $H_v(543) - H_L(543) = 0 \text{ КДж/моль}$.

Энтальпия жидкости по формуле: $H_L(T) = \Delta_f H_L^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_{P,L} dT \text{ КДж/моль}$,
 $H_L(T) = 0.127744 * T + 0.000103 * T^2 + 1.827382 * 10^{-7} * T^3 - 274.249463 \text{ КДж/моль}$. Пусть
теплоемкость газовой фазы $C_{V,L}(T) = av + bv * T + cv * T^2 + dv * T^3 \text{ КДж/моль/К}$, где
 av, bv, cv, dv нам неизвестны.

Энтропия жидкой фазы $S_L(T) = S_L^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,L}}{T} dT$. Зададим стандартную

энтропию жидкой фазы: $S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT$. Пусть стандартная молярная

теплоемкость имеет вид $C_{P,L}^0 = a * T^n, n > 1$, следовательно

$S_L^0(T_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_{P,L}^0}{T} dT = \int_0^{T_0} \frac{a * T^n}{T} dT = \frac{C_{P,L}^0}{n}, n > 1$. Пусть $n = 2$, тогда $C_{P,L}^0 = a * T^2$. Из

справочных данных $C_{P,L}^0 = 2.05 \text{ КДж/кг} * K = 0.2341 \text{ КДж/моль}$, тогда

$S_L^0(T_0) = 0.117 \text{ КДж/Моль/К}$. Энтропия газовой фазы: $S_v(T) = S_v^0(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{P,V}}{T} dT$

Потенциал Гиббса жидкой фазы: $G_L(T) = H_L(T) + T \cdot S_L(T)$, потенциал Гиббса газовой фазы $G_V(T) = H_V(T) + T \cdot S_V(T)$. $G_L(T_{кин}) - G_V(T_{кин}) = R \cdot T \cdot \ln \frac{P_{кин}}{P_0} = 0$, следовательно $G_L(373) - G_V(373) = 0$

Составим систему уравнений (4.8) с шестью неизвестными $av, bv, cv, dv, \Delta_f H_L^0(298.15), S_V^0(P_0, T_0)$:

Подставим в систему (4.8) следующие известные параметры:

$$a = 0.12774380 \cdot 29264, b = 0.00020517 \cdot 681332451, c = 25.4821435 \cdot 545722 \cdot 10^{-7}$$

$$T_0 = 298.15, T_{кин} = 373, T_{кр} = 543, l_s(T_{кин}) = 35.9696, \Delta_f H_L^0(298.15) = -222.2, S_L^0(T_0) = 0.117$$

Расчет δ :

$$RT \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + G_V(T_{кр}) = G_L(T_{кр}) + \frac{1}{\rho}(P - P_0)$$

$$G_L(T_{кр}) - G_V(T_{кр}) = RT_{кр} \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) - \frac{1}{\rho}(P - P_0) = \delta$$

$R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}), \rho = 0.700 \text{ г}/\text{см}^3 = 700 \text{ кг}/\text{м}^3 = 6140.3704 \text{ моль}/\text{м}^3. P_0 = 10^5 \text{ Па}$, $P = 15.624 \cdot 10^5 \text{ Па}$, следовательно $\delta = 12.171$. Подставляем в (4.9) $\delta = 12.171$.

Решаем эту систему уравнений, получаем:

$$av = 8.610139, bv = -0.067210, cv = 0.000177, dv = -1.526067 \cdot 10^{-7}$$

$$\Delta_f H_V^0(298.15) = -180.672994 \text{ кДж}/\text{моль}, S_V^0(P_0, T_0) = 0.2298 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$$
 следовательно:

$$C_{V,L}(T) = -0.067210 \cdot T + 0.000177 \cdot T^2 - 1.526067 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 + 8.610139 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}. \text{ Из (4.6)}$$

следует, что $\varphi_{in,L} = 127.7438$, $\varphi_{1,L} = 1025.8841$, $\varphi_{2,L} = 9136.9059$, $\varphi_{-2,L} = \varphi_{3,L} = 0$, а

$$\varphi_{in,V} = 8610.1391, \varphi_{1,V} = -336050, \varphi_{2,L} = 2943000, \varphi_{-2,V} = 0, \varphi_{3,V} = -12717000$$
 Из условия

$$H(298.15) = \Delta_f H_L^0(298.15) \text{ и формулы (4.7) получаем:}$$

$$[H_L^0(298.15) - H_L^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,L} = 52049 \text{ Дж}/\text{моль}, [H_V^0(298.15) - H_V^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1,V} = 838340 \text{ Дж}/\text{моль}.$$

Из условий $S_L^0(T_0) = 0.117 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$, $S_V^0(P_0, T_0) = 0.2298 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}$ ($T = 373 \text{ К}$,

$$S_L(P, T) = 0.1748 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}, S_V(P, T) = 0.2712 \text{ кДж}/\text{Моль}/\text{К}) \text{ и формулы (5) получаем}$$

$$\varphi_{0,L} = 352.4915, \varphi_{0,V} = 35404$$

С использованием вышеописанных методик были восстановлены, для докритических температур (таблица 4.1), выражения для потенциалов Гиббса жидких и газообразных углеводородных горючих (таблица 4.2). На рис. 4.1 представлено сравнение восстановленной зависимости теплоты парообразования углеводородного топлива (вычисленной с использованием восстановленной зависимости для потенциала Гиббса) с расчетами по эмпирическим степенным формулам.

Таблица 4.2. Восстановленные коэффициенты температурной части потенциала Гиббса для газовой (г) и жидкой (ж) фаз ($\varphi_{-2} = 0$)

Коэфф/ горючее		φ_{ln}	φ_0	φ_1	φ_2	φ_3	$[H^0(298.15) - H^0(0)] + 10^4 \varphi_{-1}$ Дж/моль	$\Delta_f H^0(298.15)$ КДж/моль b
ДТ	г	4248.193	16886	-140940	1086800	-4015800	494590	-280.2
	ж	138.759	339.18 3	2877.662	4757.611	0	69473	-331.3
Керосин	г	4707.186	18941	-165270	1325000	-5161300	514270	-206.7
	ж	104.034	252.25 1	2312.986	3987.989	0	53692	-253.4
Бензин	г	8610.139	35404	-336050	2943000	-12717000	838340	-180.7
	ж	127.7438	352.49 2	1025.884	9136.906	0	52049	-222.2

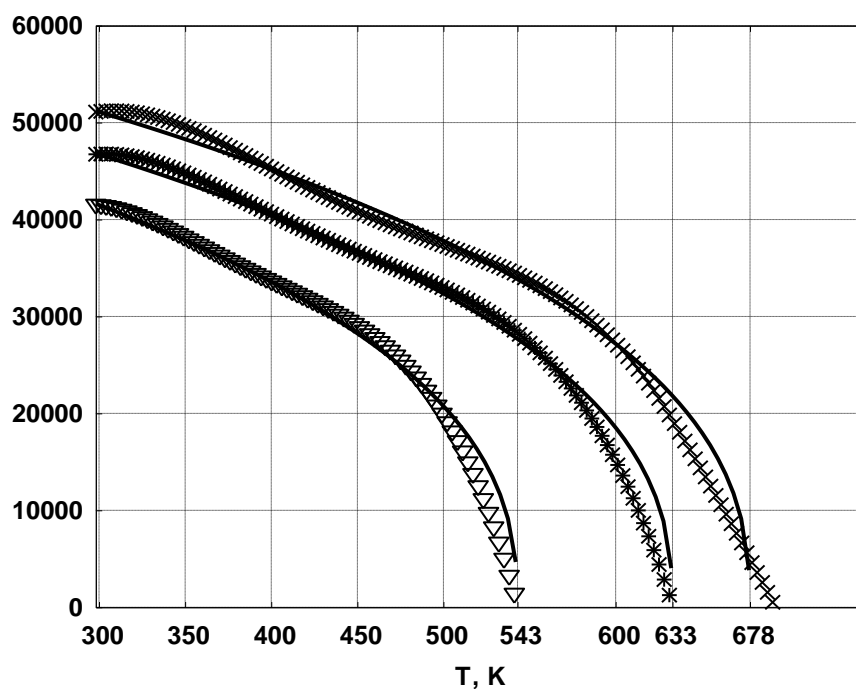


Рис.4.1. Теплота парообразования (× - дизельное топливо, * - керосин, ∇ - бензин (расчет по восстановленным зависимостям потенциалов Гиббса жидкой и газовой фаз), сплошные линии - эмпирические формулы

Восстановленные свойства жидкого и газообразного керосина верифицировались на экспериментальных работах по определению времени и равновесной температуре испарения одиночных покоящихся капель, а также по расстоянию полного испарения капель,двигающихся в спутном потоке воздуха. Наилучшее согласие используемой модели с экспериментальными и расчетными данными было достигнуто при $\beta = 0.8$.

На рисунке приведены результаты сравнения с данными, рассчитанными по программе K.H. Liew, E. Urip, S.L. Yang, C.J. Marek An Interactive Microsoft Excel Program for Tracking a Single Evaporating Droplet in Crossflow // NASA/TM-2004-212910, которые отмечены маркерами (рис. 4.2).

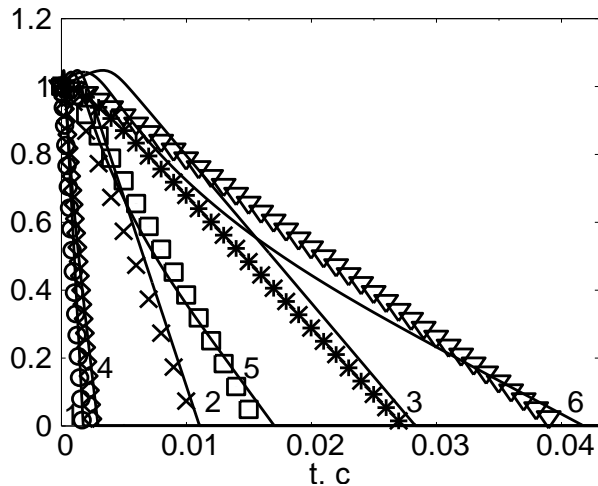
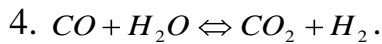
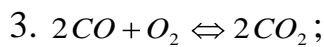
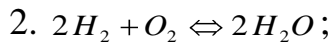
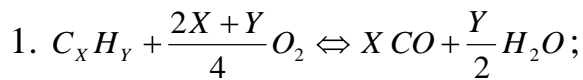


Рис.4.2. Временная зависимость относительного квадрата диаметра испаряющейся одиночной капли керосина в воздухе $T_{s_0}=298.15$ К (1, 2, 3, \circ , \times , * – без скоростного отставания, $T_0=1000$ К; 4, 5, 6, \diamond , \square , ∇ - $u_0 - u_{s_0} = 20$ м/с, $T_0=600$ К; 1, 4, \circ , \diamond - $d_{s_0} = 20$ мкм; 2, 5, \times , \square - $d_{s_0} = 50$ мкм, 3, 6, *, ∇ , - $d_{s_0} = 80$ мкм).

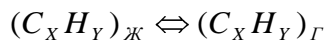
4.2 Химические превращения в газовой фазе

Необходимо отметить, что при построении физико-математических моделей взрывных процессов крайне важно использовать согласованные модели термодинамических свойств веществ и химической кинетики. В настоящей работе используется модель термодинамики основанная на восстановлении зависимости потенциала Гиббса от температуры, давления и состава для всех, используемых при численном моделировании, газообразных и жидких компонентов (в том числе и брутто-веществ). Также все химические и фазовые превращения считаются обратимыми, при этом константы скоростей прямых и обратных реакций согласуются между собой в рамках принципа детального равновесия [98].

При моделировании волн горения и детонации в смеси керосина с воздухом в неравновесной постановке (решается система 2.26-2.34) рассматривается смесь, состоящая из 5 компонентов: C_xH_y , O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 , N_2 , химические превращения между которыми описываются брутто-механизмом, заимствованным из [80] и модифицированным в [8].



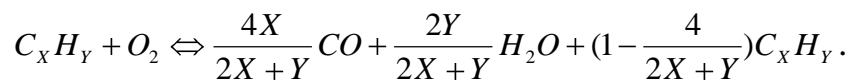
Процесс испарения горючего может быть описан химической реакцией [8, 232]:



Расчеты по “неравновесной” модели проводились для случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми [80] и, когда все реакции считались обратимыми, аппроксимации констант скоростей прямых реакций брались из [80].

Необходимо отметить, что выражение для скорости первой реакции [80] имеет вид: $\vec{W}^{(1)} = \vec{K}^{(1)}(T, p) y_{C_xH_y} y_{O_2}$. Объемные концентрации компонентов y_i входят в выражение для $\vec{W}^{(1)}$ в первой степени, поэтому, если считается, что реакция обратимая, то для обеспечения выполнения термодинамических соотношений она

может быть переписана в виде:



Для произвольной r -ой химической реакции, в которой участвует N веществ M_i , протекающей со скоростью: $\vec{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)}(T, p) \prod_{i=1}^N (y_i)^{b_i^{(r)}}$, для случая

$b_i^{(r)} > 0$, справедлива форма записи $\sum_{i=1}^N b_i^{(r)} M_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N (b_i^{(r)} + a^{(r)}(\nu_i^{(r)} - \bar{\nu}_i^{(r)})) M_i$, где

$a^{(r)} = \min_{\substack{i=1,N \\ \nu_i^{(r)} \neq 0}} \left(\frac{b_i^{(r)}}{\nu_i^{(r)}} \right)$. При этом все стехиометрические коэффициенты являются

неотрицательными величинами.

4.3 Математическое моделирование стационарных волн детонации и дефлаграции в газокапельной керосино-воздушной смеси

Проанализируем, на сколько модель продуктов сгорания, приведенная в разделе 4.2 соответствует реальным продуктам высокотемпературного сгорания керосина в воздухе. Для этого, численно решив систему нелинейных алгебраических уравнений (2.39-2.42) рассчитаем равновесную адиабату продуктов сгорания. При численном моделировании считалось, что продукты сгорания керосина в воздухе включали 26 веществ: CO , CO_2 , CH , CH_2 , CH_3 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , HCO , CH_2O , H_2 , OH , H_2O , O_2 , H_2O_2 , HO_2 , NO , N_2 , CN , HCN , C^* (сажа), C , H , O , N , начальная температура смеси равнялась 298, 15 К, давление 101325 Па, варьировалась отношение массы жидкого керосина к массе воздуха.

На рисунках 4.3-4.4 представлены равновесные адиабаты на фазовых плоскостях p - V и p - T , соответственно, при различных отношениях начальной массы жидкого керосина к воздуху. Видна немонотонность изменения адиабат при переходе соотношения горючее-окислитель через стехиометрию $0.05 < M_K / M_{Air} < 0.15$ (кривые 1-3, рис. 4.3-4.4). Давление в точках Чепмена-Жуге детонации имеет минимум при $M_K / M_{Air} \approx 0.3$, в точках Чепмена-Жуге дефлаграции – слабо зависит от M_K / M_{Air} (рис. 4.3). Температура сильно зависит от M_K / M_{Air} и имеет максимальное значение в окрестности стехиометрии (рис. 4.4.).

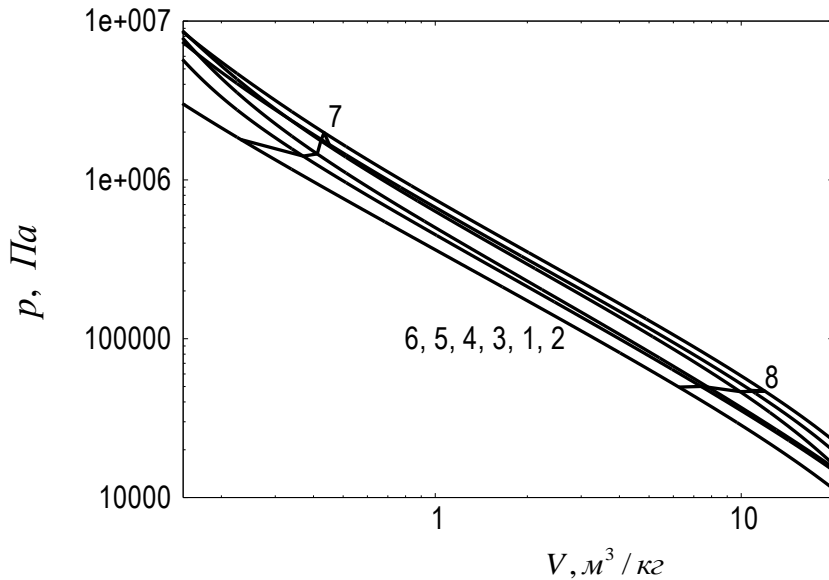


Рис.4.3. p - V диаграмма при различных отношениях массы керосина к массе воздуха. 1- 0.05; 2 – 0.1; 3 – 0.15; 4 – 0.2; 5 – 0.3; 6 – 1.0; 7 – точки Чепмена-Жуге детонации, 8 – точки Чепмена-Жуге дефлаграции

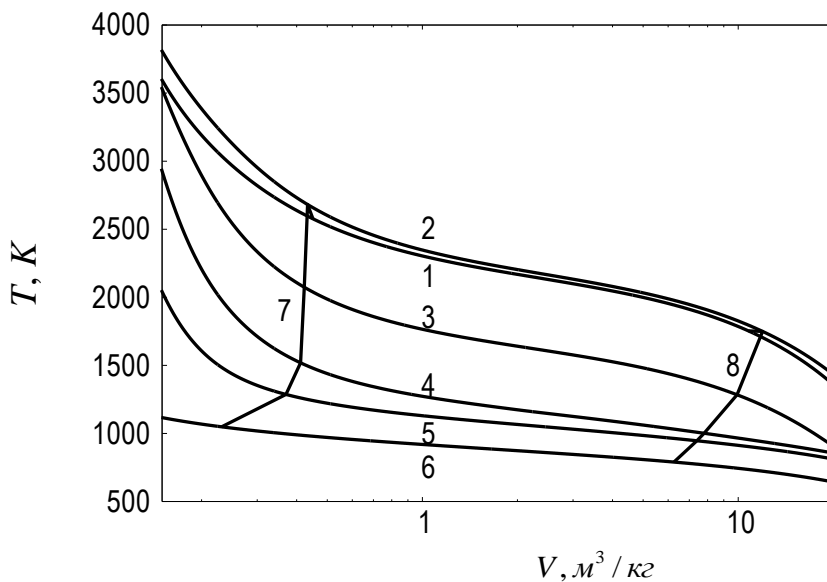


Рис. 4.4. V - T диаграмма при различных отношениях массы керосина к массе воздуха (1- 0.05; 2 – 0.1; 3 – 0.15; 4 – 0.2; 5 – 0.3; 6 – 1.0; 7 – точки Чепмена-Жуге детонации, 8 – точки Чепмена-Жуге дефлаграции)

На рисунке 4.5 представлены результаты сравнения V - T диаграмм рассчитанных для 26 компонентных продуктов сгорания и для семикомпонентных. Видно, что в диапазоне $0.5 \leq M_K / M_{Air} \leq 0.2$, адиабаты и точки Чепмена-Жуге близки. Заметное отличие наблюдается выше точки Чепмена-Жуге детонации при $M_K / M_{Air} = 0.1$ и в окрестности точки Чепмена-Жуге дефлаграции при $M_K / M_{Air} = 0.2$

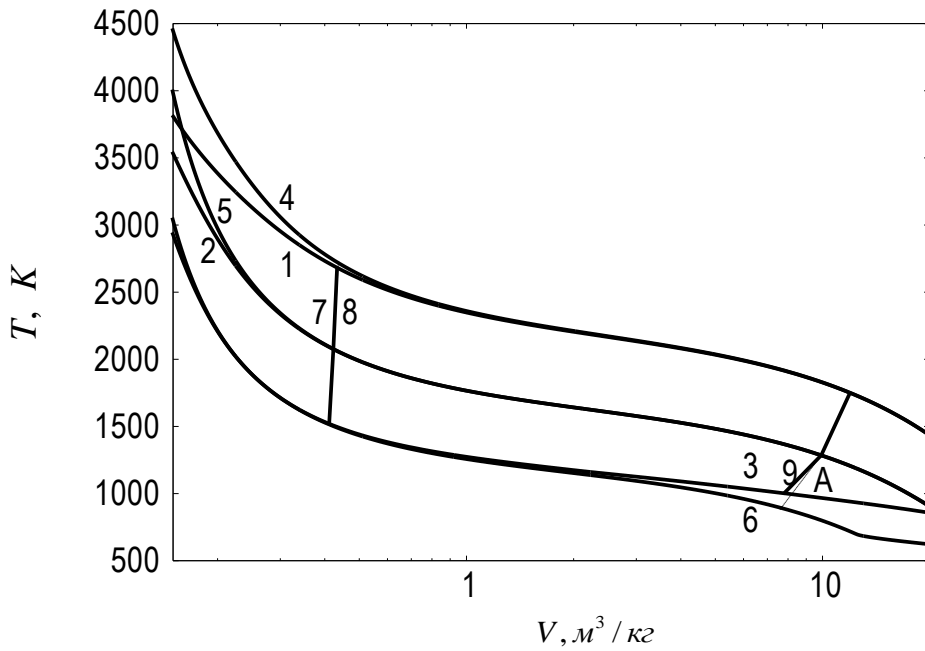


Рис. 4.5. V - T диаграмма при различных отношениях массы керосина к массе воздуха. Полный (1-3, 7, 9) и сокращенный (4-6, 8, А) набор веществ 1, 4- 0.1; 2, 5 – 0.15; 3, 6 – 0.2; 4 – 0.2; 5 – 0.3; 6 – 1.0; 7, 8 – точки Чепмена-Жуге детонации; 9, А – точки Чепмена-Жуге дефлаграции

Содержание сажи в продуктах сгорания в заметных концентрациях начинает проявляться при дефлаграции при $M_K / M_{Air} = 0.2$ (рис. 4.6) и составляет около 2 % по массе, при $M_K / M_{Air} = 0.3$ сажа присутствует и при детонации и при дефлаграции (рис. 4.6).

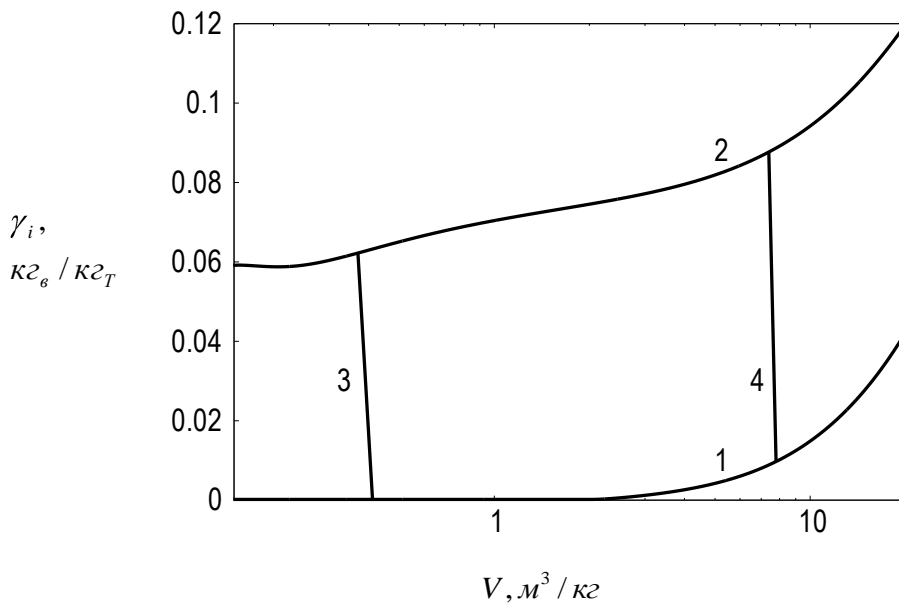


Рис. 4.6 Зависимость массовой доли твердого углерода от удельного объема вдоль равновесной адиабаты при различных отношениях массы керосина к массе

воздуха. 1- 0.2; 2 – 0.3; 3 – точки Чепмена-Жуге детонации; 4 – точки Чепмена-Жуге дефлаграции

Были проведены расчеты параметров детонации Чепмена-Жуге (рис. 4.7) и нормальной стационарной волны горения при разных начальных температурах (рис. 4.8). Аналогично предыдущим расчетам, решалась система соотношений типа Ренкина-Гюгонио (2.39-2.42), в предположении, о полном испарении капель, дополненная условиями, что продукты сгорания за волной находятся в состоянии термодинамического равновесия (“идеальная” модель).

Сравнивались результаты численного моделирования по “упрощенной” (продукты сгорания включали 7 компонентов) и “полной” (продукты сгорания состояли из 26 веществ) моделям. Результаты расчетов с высокой точностью совпали вплоть до соотношения керосин/воздух = 0.3. Дальнейшее отличие связано с появлением сажи в составе продуктов сгорания, наличие которой не учитывается при моделировании с использованием упрощенной модели.

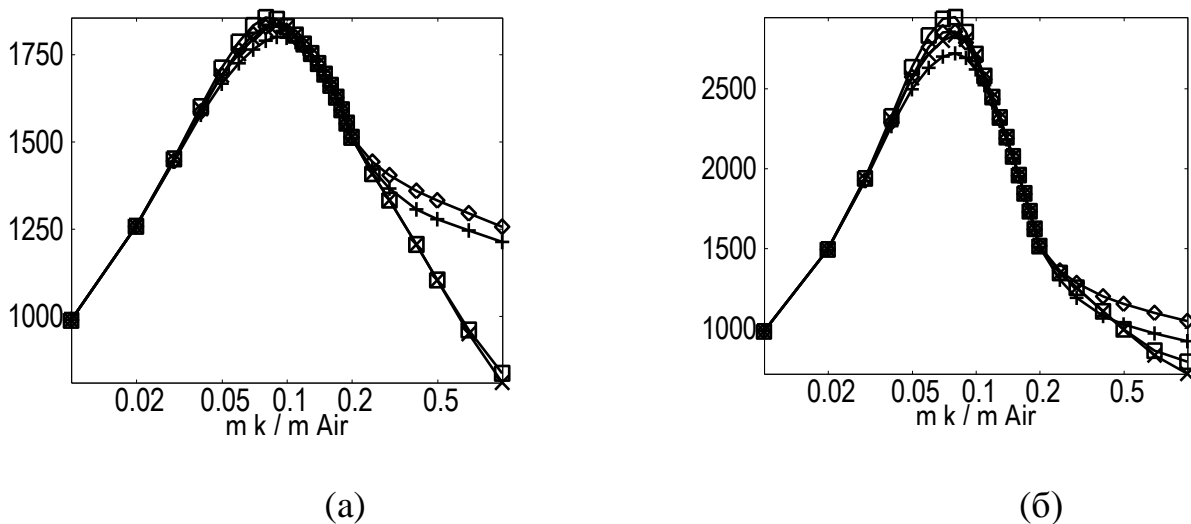


Рис. 4.7. Зависимость параметров детонации керосино-воздушной горючей смеси в состоянии Чепмена-Жуге от соотношения керосин-воздух: (а) скорость ДВ; (б) температура за ДВ. (◇, □ – $p_0 = 101325$ Па, +, × – $p_0 = 10132,5$ Па). Модели: ◇, + – “полная”, □, × – “упрощенная”

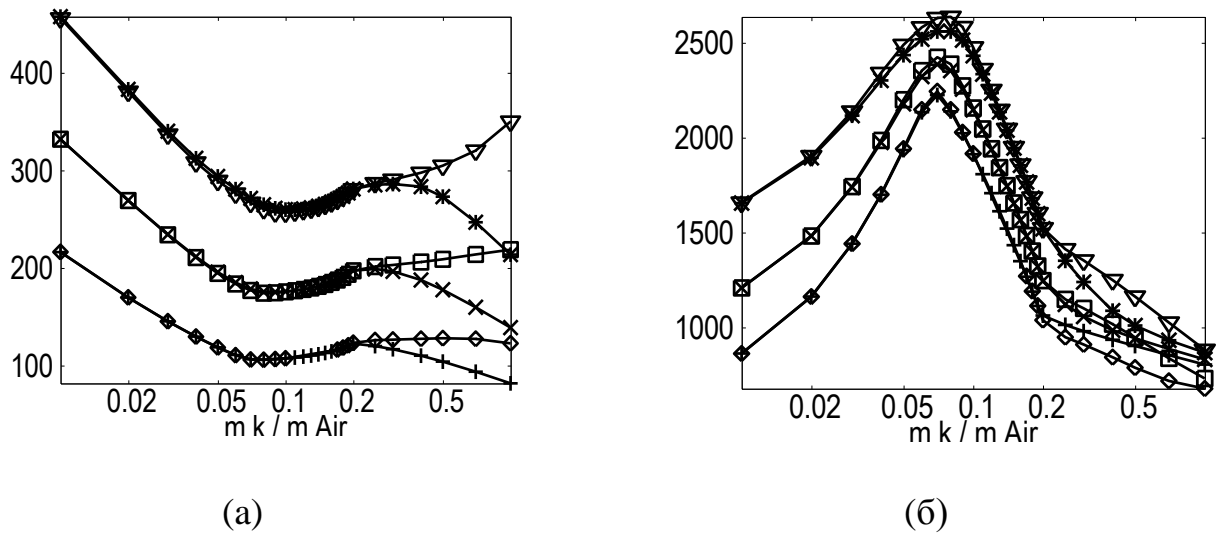


Рис. 4.8. Зависимость параметров продуктов сгорания в волне горения от соотношения керосин-воздух: (а) максимальная скорость; (б) температура. ($\nabla, *$ - $T_0=1500$ К, \square, \times - $T_0=1000$ К, $\diamond, +$ - $T_0=600$ К). Модели: $\nabla, \square, \diamond$ - "упрощенная"; $*$, $\times, +$ - полная

Расчеты по "неравновесной" модели, интегрировалась система дифференциально-алгебраических уравнений (2.26-2-34), проводились для случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми [80] и, когда все реакции считались обратимыми, аппроксимации констант скоростей прямых реакций брались из [80]. Рассчитанные параметры детонации Чепмена-Жуге (удовлетворительно согласуются с данными [208]) по "равновесной" и "неравновесной" с обратимыми реакциями моделям (рис. 4.9), они также близки при соотношении горючее-окислитель < 0.3 (стехиометрическое соотношение ~ 0.07).

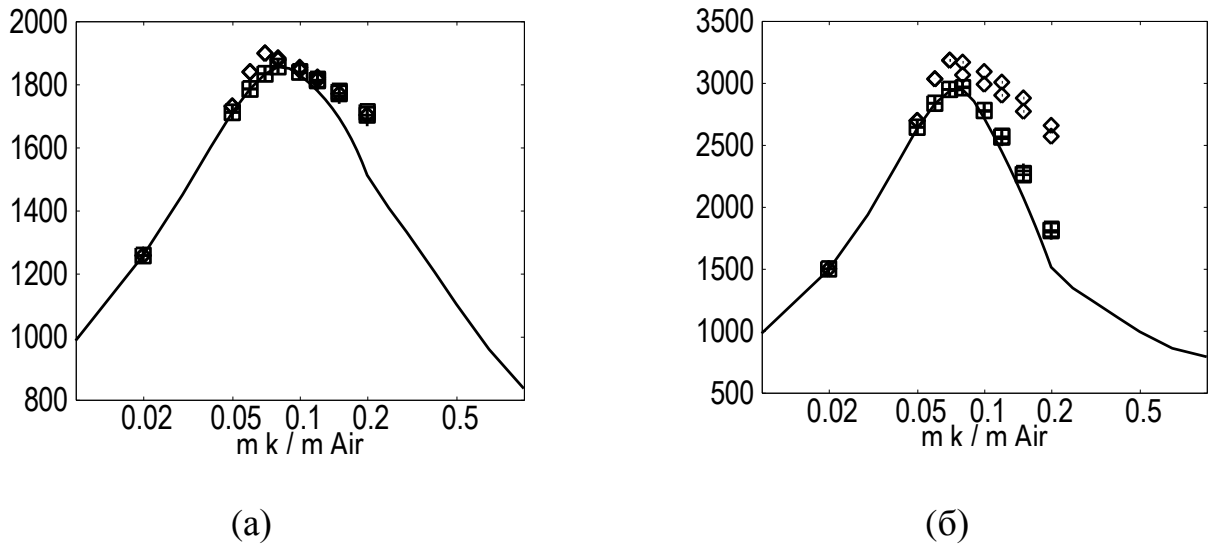


Рис. 4.9. Зависимость параметров детонации керосино-воздушной горючей смеси в состоянии Чепмена-Жуге от отношения массы керосина к массе воздуха при разных начальных диаметрах ($d_s^0=10; 50$ мкм): (а)- скорость ДВ; (б)- температура за ДВ. Модели: сплошная линия – “идеальная”; \square – “равновесная”; $+$ – “неравновесная обратимая”; \diamond – “неравновесная необратимая”

“Неравновесная” модель с необратимыми реакциями дает завышенные значения температуры (рис. 4.9, 4.10), а также, конечные температуры, достигаемые в ДВ, зависят от начального диаметра капель (кривые 3, 6 рис. 4.10). Задержки воспламенения, рассчитанные по всем моделям в рассмотренных вариантах близки.

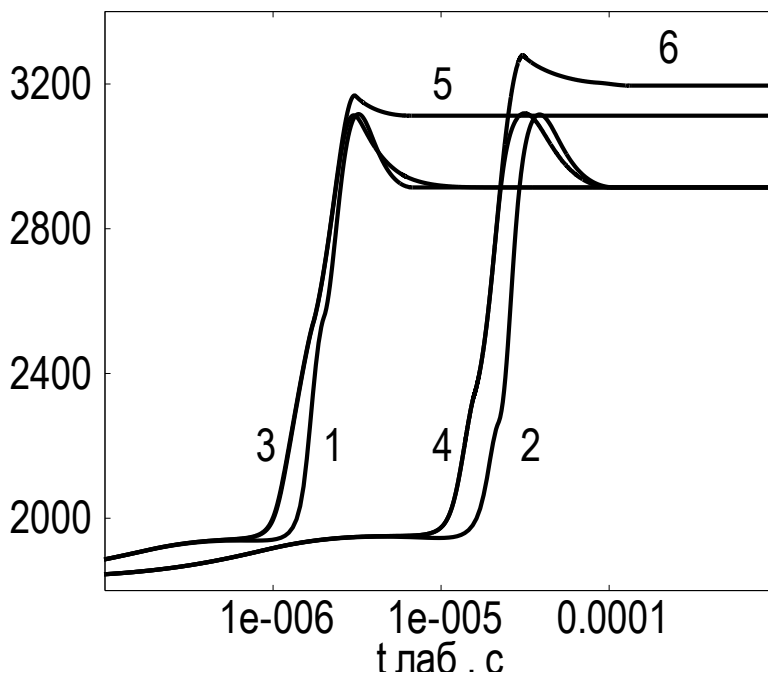


Рис. 4.10. Распределение температуры в ДВ ($m_k/m_{air}=0.1$). Модели: 1, 2 - “равновесная”; 3, 4 - “неравновесная обратимая”; 5, 6 - “неравновесная необратимая”; 1, 3, 5 – начальный диаметр капле $d_s^0=10$ мкм; 2, 4, 6 - $d_s^0=50$ мкм

На рис. 4.11. приводятся траектории процессов на фазовой плоскости удельный объем – температура ($V-T$). При моделировании процессов с использованием “равновесной” и “неравновесной-обратимой” моделей траектория заканчивается на равновесной адиабате, а при “неравновесной - необратимой” - нет.

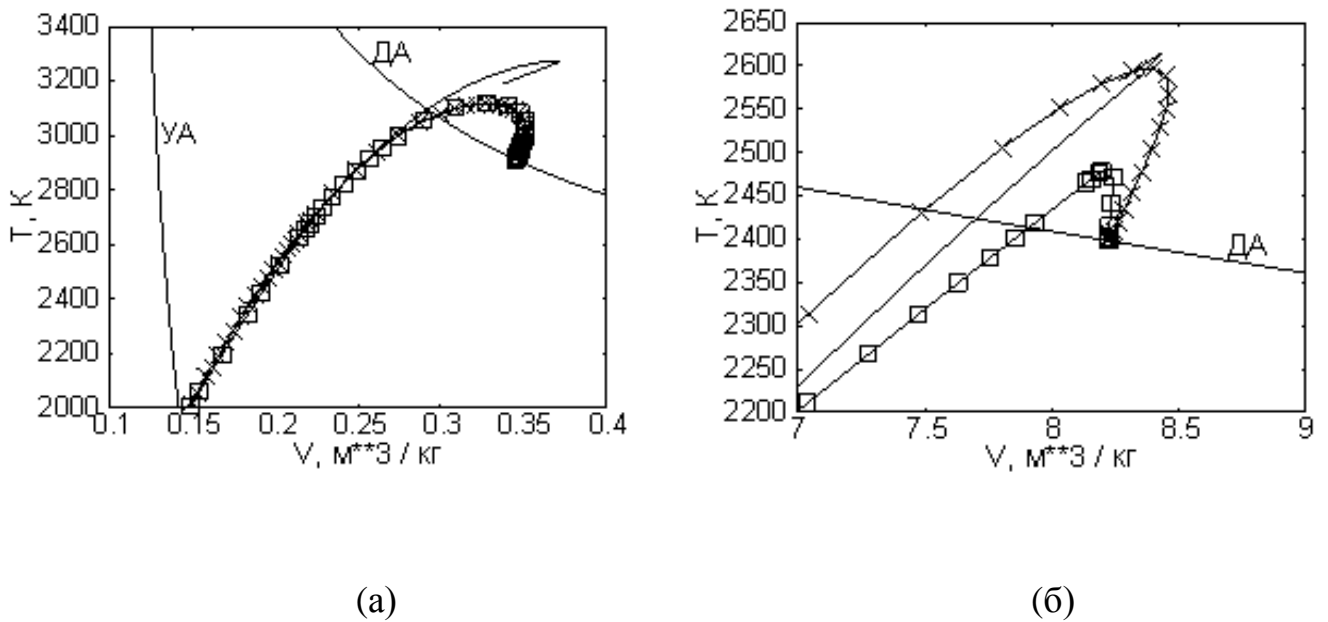


Рис. 4.11. (а) Изменение температуры в ДВ ($T_0 = 298.15$ К); (б) температуры в ВГ ($T_0 = 1000$ К) на фазовой плоскости $V-T$ ($p_0 = 101325$ Па, $d_s^0 = 50$ мкм): $m_k/m_{air}=0.1$. Модели: \times - “равновесная”; \square - “неравновесная - обратимая”; сплошная линия - “неравновесная - необратимая”. (ДА - равновесная адиабата, УА - ударная адиабата)

Необходимо отметить, что при больших массовых долях горючего температуры, рассчитанные по “неравновесной” с обратимыми реакциями и “равновесной” моделям, сравниваются на крайне больших расстояниях от головной ударной волны. Данный факт, по-видимому, является ограничительным для использования “равновесной” модели.

4.4. Численное моделирование детонации керосина в воздухе в модельной ударной трубе

Рассчитывалось одномерное нестационарное течение газок капельной смеси керосина с воздухом, учитывались процесс испарения капель и газофазные химические превращения (решалась система уравнений (2.1-2.4, 2.7-2.13, 2.15-2.25), дополненная моделями термодинамики, химической кинетики и сопротивления и тепломассообмена). Численное моделирование проводилось с использованием оригинального сеточно-характеристического метода [215-218], расчетными узлами, при этом, являлись траектории газа и частиц, траектория ударной волны, контактного разрыва, характеристики, образующие веер волн разрежения, граничные траектории частиц и границы расчетной области. При этом ударные волны, контактные разрывы и граничные траектории частиц моделировались двумя подвижными узлами расчетной сетки, координата и скорость движения которых были равны, а перепады параметров удовлетворяли условиям динамической совместности. Число расчетных узлов выбиралось из условия сходимости результатов и составляло, в зависимости от начальных данных, от 5 до 10 тыс узлов.

Исследовалось течение в ударной трубе (рис. 4.12), заполненной воздухом, возникающее после распада разрыва на границе камер высокого ($X < 1$ м) и низкого давления. Капли керосина размещались при $2 < X < 9$ м. После распада разрыва образовывалась ударная волна, которая инициировала испарение капель керосина и воспламенение горючей смеси.

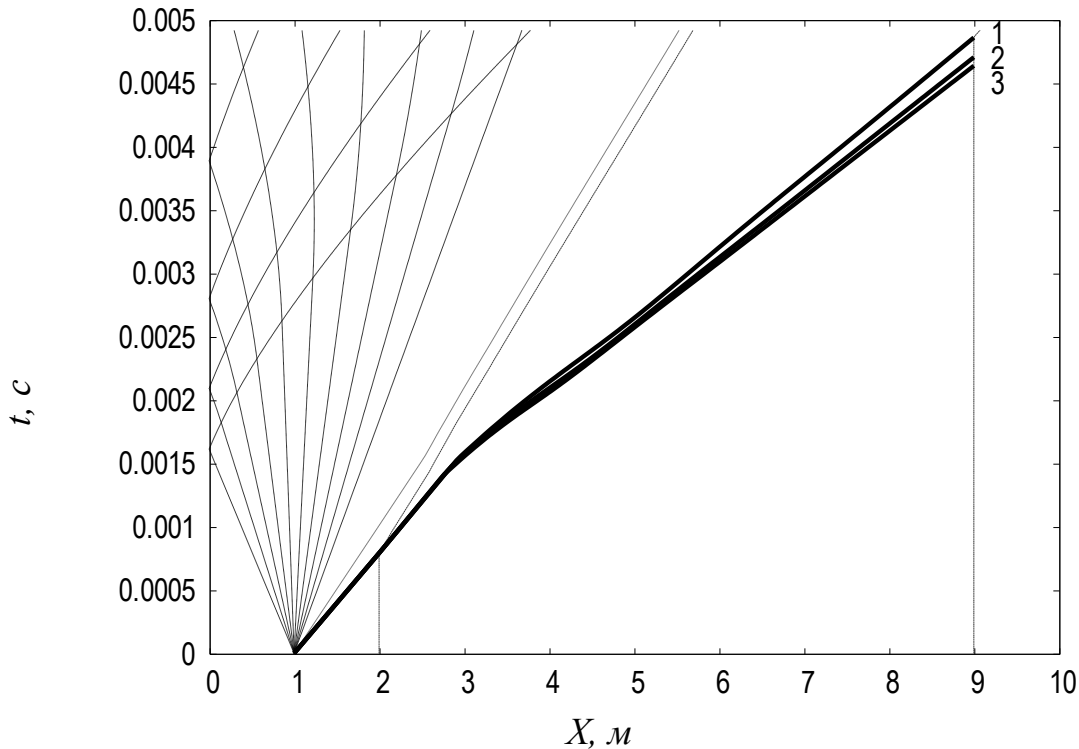


Рис. 4.12. Временная развертка течения в ударной трубе (крупный пунктир – характеристики, образующие веер волн разрежения; пунктир – контактный разрыв; штрих-пунктир – границы области распространения капель керосина; сплошная линия – траектория головной ударной волны при различных значениях отношения массы капель к массе воздуха (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1))

Временная развертка течения (рис. 4.12) приведена схематично и объединяет на одном рисунке три варианта расчета течений при различных значениях отношения массы капель к массе воздуха. Во всех трех расчетах траектории характеристик, образующих веер волн разрежения, контактный разрыв и граничная траектория частиц практически сливаются, существенно отличаются только траектории головной ударной волны (с точки излома на графике – детонационной).

Скорость ударной волны (рис. 4.13) после входа в двухфазную область в начале несколько падает, затем капли испаряются, начинаются экзотермические химические реакции (температура за ударной волной после распада разрыва составляет около 1000 К (рис. 4.14), что превышает температуру самовоспламенения горючей смеси), образуется волна горения,

сопровождающаяся ростом давления, которая распространяется вслед за ударной волной. В момент времени около 1.4 мс, образовавшаяся перед фронтом горения, ударная волна догоняет головную ударную волну (рис. 4.13), что приводит к резкому увеличению ее скорости и к образованию детонационной волны. К моменту времени около 3 мс детонационная волна выходит на режим распространения близкий к стационарному.

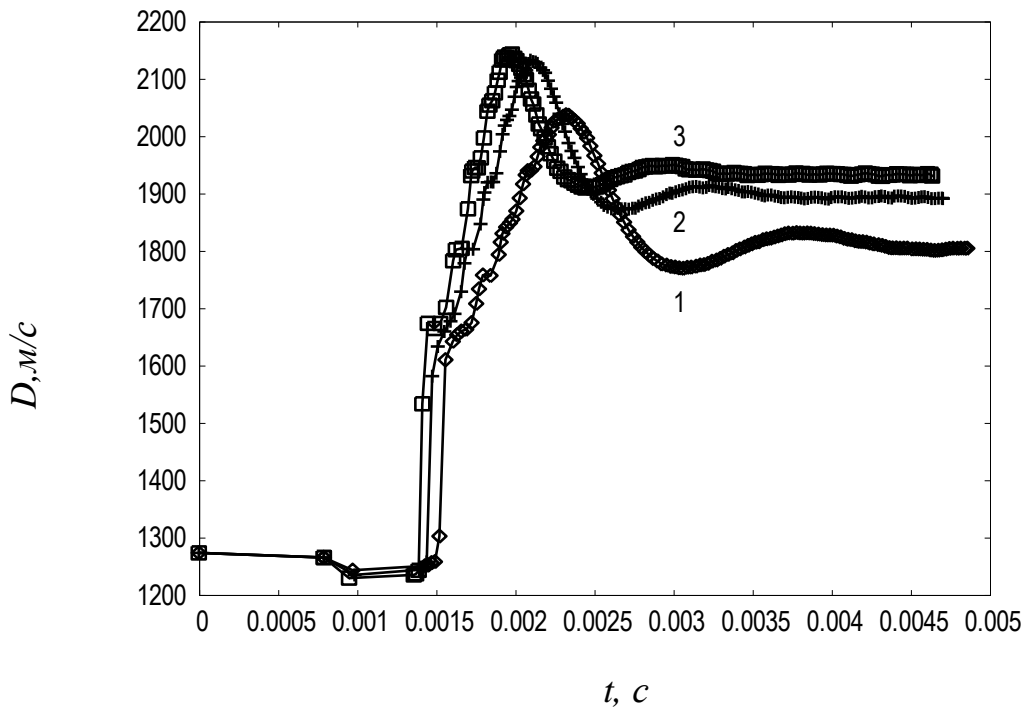


Рис. 4.13 Зависимость скорости ударной волны от времени при различных значениях отношения массы капель к массе воздуха (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1). Диаметр капель керосина – 40 мкм.

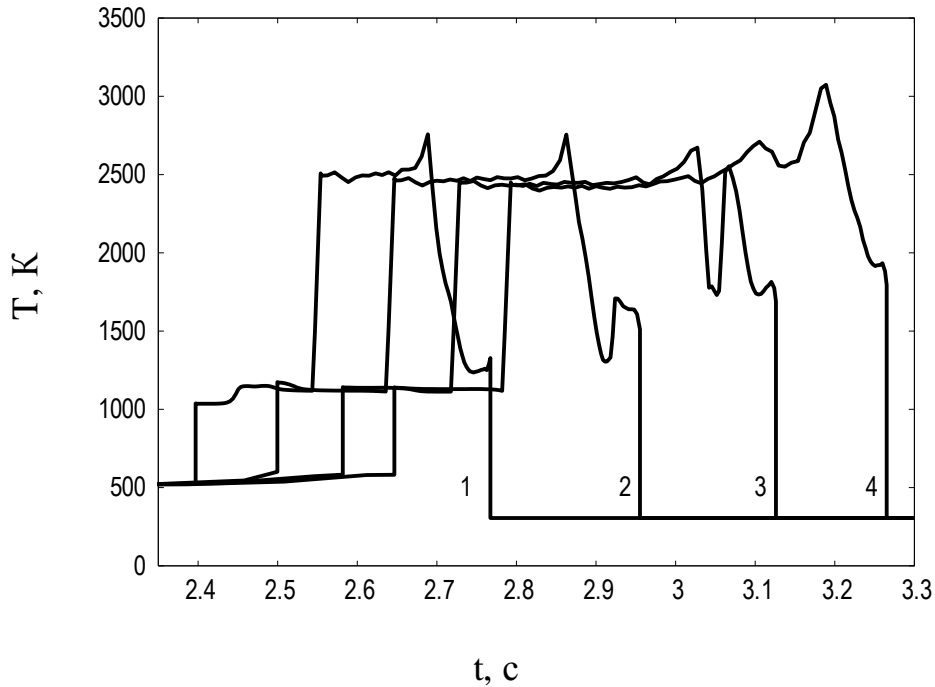


Рис. 4.14. Распределение температуры в различные моменты времени (1 – 1.41 мс, 2 – 1.53 мс, 3 – 1.63 мс, 4 – 1.70 мс). Отношение массы капель к массе воздуха – 0.1.

Необходимо отметить, что расчетным путем получена картина течения с двумя очагами воспламенения, качественно совпадающая с наблюдаемой в экспериментах. После ускорения головной ударной волны температура за ней существенно выросла, что привело к воспламенению горючей смеси непосредственно за ударной волной (рис. 4.14, кривые 1-3). При дальнейшем распространении детонационной волны очаги воспламенения слились, образовав непрерывную область “сгоревшего” газа (рис. 4.14, кривая 4).

4.5 Выводы к Главе 4

Разработаны физико-математическая модель, вычислительные алгоритмы и комплекс программ для моделирования инициирования и распространения детонационной волны в канале по газочапельной горючей смеси.

Разработана и оттестирована самосогласованная методика восстановления непротиворечивой системы теплофизических свойств тяжелого углеводородного горючего в жидком и газообразном состояниях.

Рассчитаны равновесные адиабаты продуктов сгорания керосино-воздушных горючих смесей при различных отношениях начальных масс керосина и воздуха ($0.05 \leq M_K / M_{Air} \leq 0.4$).

Проведено численное моделирование стационарных волн горения и детонации в стандартных условиях при отношении начальных масс керосина и воздуха в диапазоне от 0.01 до 1. Расчетным путем получена структура стационарных волн горения и детонации, включающая нагрев и испарение частиц, воспламенение и соответствующее изменение температуры и состава продуктов сгорания. Исследовано влияние массовой доли керосина на минимальную скорость стационарной детонации и максимальную скорость газа при которой существует стационарная волна горения.

Показано, что использование модели горения с необратимыми реакциями может приводить к завышенным температурам продуктов сгорания, а также к зависимости конечной температуры от диаметра капель при неизменной массовой доле горючего.

Расчетным путем получено, что параметры стационарных волн горения и детонации асимптотически стремятся к равновесным значениям – точке на равновесной адиабате.

Проведено численное моделирование детонации газочапельной керосино-воздушной горючей смеси в модельной ударной трубе при различных соотношениях горючее-окислитель. Расчетным путем получена временная развертка процесса, включающая: взаимодействие падающей ударной волны с керосино-воздушной газочапельной горючей смесью; нагрев горючей смеси; испарение капель керосина с последующими экзотермическими газофазными химическими превращениями; образование волны сжатия; формирование и распространение волны детонации; выход детонационной волны на режим, близкий к стационарному.

Расчетным путем обнаружено, наблюдаемое в экспериментальных исследованиях, двухочаговое воспламенение горючей смеси.

Заключение

В диссертационной работе получены следующие основные результаты:

1. Разработана уточненная замкнутая физико-математическая модель (включающая подмодели: термодинамики, химической кинетики и тепломассообмена) детонации и дефлаграции газочапельной смеси, состоящей из многокомпонентного газа и испаряющихся капель в каналах.

2. Разработаны эффективные алгоритмы решения дифференциально-алгебраической системы уравнений, включающей уравнения, описывающие законы сохранения массы, импульса, энергии, химических компонентов и числа частиц, а также газочапельную химическую кинетику, сопротивление и тепломассообмен.

3. Рассчитаны равновесные адиабаты (детонационные и дефлаграционные) для смесей водород-кислород-вода, водород-воздух-вода, метан-воздух-вода, метанол-воздух, керосин-воздух.

4. Проведено численное моделирование стационарной детонационной волны в газочапельных смесях, состоящей из горючей смеси водорода и метана с воздухом и капель распыленной воды. Исследовано влияние массовой доли и диаметра капель на параметры волны детонации. Определены параметры пересжатых детонационных волн и волн детонации Чепмена - Жуге.

5. Проведено численное моделирование стационарной детонационной волны в газочапельной смеси, состоящей из капель метанола и воздуха. Исследовано влияние массовой доли и диаметра капель на тонкую структуру детонационной волны. Определены параметры детонации Чепмена-Жуге.

6. Предложен способ восстановления термодинамических свойств углеводородных горючих сложного состава (в рамках модели однокомпонентной капли) для жидкой и газовой фазы. Получены соответствующие коэффициенты, входящие в температурную часть потенциалов Гиббса для бензина, керосина и дизельного топлива.

7. Проведено численное моделирование стационарных волн дефлаграции и детонации керосино-воздушных газочапельных горючих смесей при различных значениях массовой доли горючего. Получены параметры волн детонации и дефлаграции в режиме Чепмена-Жуге.

8. Проведено численное моделирование детонации газочапельной керосино-воздушной горючей смеси в модельной ударной трубе при различных соотношениях горючее-окислитель. Расчетным путем получена временная развертка процесса, включающая: взаимодействие падающей ударной волны с керосино-воздушной газочапельной горючей смесью; нагрев горючей смеси; испарение капель керосина с последующими экзотермическими газофазными химическими превращениями; образование волны сжатия; формирование и распространение волны детонации; выход детонационной волны на режим, близкий к стационарному.

Список литературы

1. Гидаспов В.Ю., Кузнецова С.В., Москаленко О.А., Чугунков С.А. Комплекс программ для решения модельных задач физической газовой динамики // Тезисы докладов XV Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2007), Алушта, 25-31 мая 2007 г. – М.: ЗАО «Издательское предприятие «Вузовская книга», 2007. С. 157-158.

2. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях // Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008), 24-31 мая 2008 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ. 2008. С. 140-143.

3. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях // Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. Т. 16. № 2. С. 51-61.

4. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в керосино-воздушных смесях // Материалы IX Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2012), 25-31 мая 2012 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2012. С.127-130.

5. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в горючей смеси водорода с кислородом и керосино - воздушных смесях // Интеграция науки и практики как механизм эффективного развития современного общества, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2012. С. 85-89.

6. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн детонации в горючих смесях углеводородов с воздухом // Материалы XVIII Международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2013), 22-31 мая 2013 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2013. С. 539-542.

7. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в горючих смесях углеводородов с воздухом // Современная система высшего образования: опыт прошлого – взгляд в будущее, Сборник материалов и докладов второй международной научно-практической конференции, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2013. С. 187-192.

8. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси // Вестник МАИ, М., Изд-во Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, 2014. Т.21. № 1. С. 169-177.

9. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси // Материалы X Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях(NPNJ'2014), 25-31 мая 2014 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2014. С.133-135.

10. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушных горючих смесях // Труды ТГУ. Серия физическая. Издательский дом ТГУ, 2014. Т.292. С.51-53.

11. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование

стационарных волн горения и детонации в смеси тяжелого углеводородного горючего с воздухом // Материалы XIX Международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), 24-31 мая 2015 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2015. С. 408-411.

12. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Восстановление теплофизических свойств и численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси тяжелого углеводородного горючего с воздухом // Наука, культура и общество: исторический опыт и перспективы развития, Материалы седьмой международной научно-практической конференции, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2015. С. 58-61.

13. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газочапельной смеси падающей ударной волной // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016), 25-31 мая 2016 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2016. С. 132-135.

14. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Северина Н.С. Rough analysis of the flow with the shock waves in the channels with sloping borders // International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena, 2-6 of October 2016, Sochi. 2016. С. 115-121.

15. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газочапельной смеси падающей ударной волной // Электронный ресурс. Труды МАИ. 2016. № 90.

16. Вильямс Ф.А. Теория горения. М.: Наука, 1971. 616 с.

17. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Ч. I. 464 с.; Ч. II. 360 с.

18. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990. 660 с.
19. Faeth G.M. Evaporation and combustion of sprays // Prog. Energy Combust. Sci. 1983. Vol.9. N 1/2. P. 1-76.
20. Сполдинг Д.Б. Горение и массообмен. М.: Машиностроение, 1985. 240 с.
21. Крайко А.Н., Ватажин А.Б., Секундов А.Н. Газовая динамика. Избранное: в 2 томах. Том 1 / под общей редакцией А.Н. Крайко. - М.:Физико-математическая литература, 2000. 720 с.
22. Полежаев Ю.В. Законы горения. М.: «Энергомаш», 2006. 352 с.
23. Коровина Н.В., Жарова И.К., Кудряшова О.Б. Исследование закономерностей распространения мелкодисперсных аэрозольных сред в замкнутом пространстве // XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Сборник докладов. 2015. С. 1981-1984.
24. Мержанов А. Г. Быков В. И. Об адекватности экспериментальных и теоретических моделей процессов горения // Физика горения и взрыва. 2010. Т. 46. № 5. С. 65-70.
25. Орловская С.Г., Калинин В.В., Зуй О.Н., Турчак А.В. Исследование процессов воспламенения и горения пористых углеродных дисперсных систем // Современная наука: исследования, идеи, результаты, технологии. 2011. Вып. 1. № 6. С. 91-94.
26. Крайко А.Н., Нигматулин Р.И., Старков В.К., Стернин Л.Е. Механика многофазных сред // Итоги науки и техн. Гидромеханика. М.: Изд. ВИНТИ, 1972. Т. 6. С. 93-174.

27. Яненко Н.Н., Фомин В.М., Федоров А.В. Структура ударных, детонационных волн и комбинированных разрывов в смесях газа и частиц // Механика реагирующих сред и ее приложения. Новосибирск: Наука. Сиб. Отд-ние, 1989. С. 133-143.
28. Ивандаев А.И., Кутушев А.Г., Нигматулин Р.И. Газовая динамика многофазных сред. Ударные и детонационные волны в газовзвесьях // Итоги науки и техн. Механика жидкости и газа. М.: Изд. ВИНТИ, 1982. Т.16. С. 209-290.
29. Смирнов Н.Н., Зверев И.Н. Гетерогенное горение. М.: Изд-во МГУ, 1992. 446 с.
30. Ярин Л.П., Сухов Г.С. Основы теории горения двухфазных сред. Л.: Энергоиздат. Ленингр. Отд-ние, 1987. 240 с.
31. Sirignano W.A. Fuel droplet vaporization and spray combustion theory // Prog. Energy Combust. Sci. 1983. Vol. 9. P. 291-322.
32. Klyachko L.A. Combustion of fuel aerosols: a review // Int. Conf. on Combustion. Combustion, detonation, shockwaves. Moscow. 1994. Vol.1. P. 107-126.
33. Смирнов Н.Н. Горение и детонация в многофазных средах, содержащих жидкое горючее // Физика горения и взрыва. 1988. № 3. С. 84-94.
34. Кируан Дж.Э., Ли Т.А., Шреринг Г.Н. Экспериментальное и теоретическое исследование монодисперсного аэрозоля // Аэрокосмическая техника. 1989. № 6. С. 121-130.

- 35.** Воронин Д. В. Существование решений для стационарной детонации газовзвесей // Прикладная механика и техническая физика. 2000 .Т. 41. №6. С.42-49.
- 36.** Асланов С.К., Гири́н А. Г. К построению теории детонации аэрозолей // Физика горения и взрыва. 1988. № 4. С. 101-109.
- 37.** Хмель Т. А., Федоров А. В., Гостеев Ю. А. К теории воспламенения и горения газовзвесей // Восьмой Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике. Пермь 23-29 августа 2001 года. Аннотации докладов. Пермь, 2001.
- 38.** Стасенко А.Л. Физическая механика многофазных потоков, учеб. пособие для студентов вузов по направлению "Прикладные математика и физика"; М-во образования и науки Рос. Федерации, Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т). Москва, 2004.
- 39.** Золотко А. Н., Вовчук Я. И., Шевчук В. Г., Полетаев Н. И. Воспламенение и горение газовзвесей // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41. № 6. С. 3-14.
- 40.** Варшавский Г. А. Горение капель жидкого топлива. М.: Изд-во БНТ, 1945.
- 41.** Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Изд-во АН СССР. 1947. 2-е изд. М.: Наука, 1967. 492 с.
- 42.** Варшавский Г. А., Федосеев Д. В., Франк-Каменецкий Д. А. Квазистационарная теория воспламенения капли жидкого топлива // Физика аэрозолей. Киев: Изд-во КГУ, 1966. №1. С. 101-107.

- 43.** Godsave G.A.E. Studies of the combustion of drops in a fuel spray - the burning of single drops of fuel // Proc. 4th Symposium (Intern.) on Combustion, Williams and Wilkins Co., Baltimore, Md, 1953. P. 818-830.
- 44.** Spalding D. B. The combustion of liquid fuels // Proc. 4th Symposium (International) on Combustion, Williams and Wilkins Co., Baltimore, Md, 1953. P. 847-864.
- 45.** Goldsmith M., Penner S. S. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere // Jet Propulsion. 1954. Vol. 24. N. 4. P. 245-251.
- 46.** Агафонова Ф. А., Гуревич М. А., Тарасова Е. Ф. Горение одиночных капель // Теплообмен. Минск: Наука и техника, 1966. Т. 4.
- 47.** Polymeropoulos C. E., Peskin R. L. Ignition and extinction of liquid fuel drops - numerical computations // Combustion and Flame. 1969. Vol. 13.
- 48.** Гуревич М. А., Сиркунен Г. И., Степанов А. М. О возможности использования квазистационарного приближения при расчете предела воспламенения капли // Физика аэродисперсных систем. Киев: Изд-во КГУ, 1972. № 6.
- 49.** Гуревич М. А., Сиркунен Г. И., Степанов А. М. Расчет предела воспламенения капель // Физика аэродисперсных систем. Киев: Изд-во КГУ, 1972. № 7.
- 50.** Гуревич М. А., Сиркунен Г. И., Степанов А. М. Условия воспламенения капель // Теплообмен. Минск: Наука и техника, 1972. Гл.2.
- 51.** Вайнштейн П.Б., Нигматулин Р.И. К теории распространения пламени в смеси газа и капель // Ж. прикл. мех. и техн. физ. 1973. № 4. С. 101-108.

- 52.** Гольдшлегер Ю. И., Амосов С. Д. Механизм и принципы воспламенения и горения капли углеводородного топлива // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13. № 6. С. 813-821.
- 53.** Faeth G.M. Current status of droplet and liquid combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1977. Vol. 3. N 4. P. 191-224.
- 54.** O'Rourke P.J. The KIVA computer program for multidimensional chemically reactive fluid flows with fuel sprays // Lect. Notes Phys. 1985. N 241. P. 74-89.
- 55.** Sirignano W.A. The formulation of spray combustion models: resolution compared of droplet spacing // Trans.ASME: J. Heat Transf. 1986. Vol. 108. N 3. P.633-639.
- 56.** Zhu J.Y., Chin J.S. The study on the interdependence of spray characteristics and evaporation history of fuel spray in high temperature air cross flow // AIAA Paper. 1986. N 1528.
- 57.** Кузнецов В.Р. Влияние турбулентности на горение распыленного жидкого топлива // Физика горения и взрыва. 1988. № 6. С. 51-57.
- 58.** Sabnis J.S., de Jong F.J. Calculation of the two-phase flow in an evaporating spray using an Eulerian-Lagrangian analysis // AIAA Paper. 1990. N 0447. 15 p.
- 59.** Клячко Л.А. Горение капель топлива в турбулентном потоке воздуха // Физика горения и взрыва. 1992. № 4. С. 26-32.
- 60.** Димитров В.И. Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982. 381 с.
- 61.** Oran E.S., Boris J.P. Weak and strong ignition: II, sensitivity of the

hydrogen-oxygen system // Comb. And Flame. 1982. Vol. 48. P. 149-161.

62. Westbrook C.K. An analytical study of the shock tube ignition of mixtures of methane and ethane // Comb. Sci. and Tech. 1979. Vol. 20. P. 5-17.

63. Борисов А.А., Драгалова Е.В., Заманский В.М. Механизм и кинетика самовоспламенения метана // Химическая физика. 1982. № 4. С. 536-543.

64. Jachimowski C.J. Chemical kinetic reaction mechanism for the combustion of propane // Comb. and Flame. 1984. Vol. 55. P. 213-224.

65. Westbrook C.K., Pitz W.J. A comprehensive chemical kinetic reaction mechanism for oxidation and pyrolysis of propane and propene // Comb. Sci. and Tech. 1984. Vol. 37. P. 117-152.

66. Westbrook C.K., Dryer F.L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1984. Vol. 10. P. 1-57.

67. Peters N., Rogg B. Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems // Lecture Notes in Physics Monographs. 1993. Vol.15.

68. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Моделирование самовоспламенения и горения капель н-гептана с использованием детального кинетического механизма // Химическая физика. 2010. Т. 29. № 12. С. 50-59.

69. Lu X., Ji L., Zu L., Hou Y., Huang Ch., Huang Z. Experimental study and chemical analysis of n-heptane homogeneous charge compression ignition combustion with port injection of reaction inhibitors // Combustion and Flame. 2007. Vol.149. Iss.3. P. 261–270.

70. Mevel R., Chatelain K., Boettcher P.A., Dayma G., Shepherd J.E. Low temperature oxidation of n-hexane in a flow reactor // Fuel. 2014. Vol 126. P. 282–293.

71. Zhao Z., Li J., Kazakov A., Dryer F.L., Zeppieri S. P. Burning velocities and high-temperature skeletal kinetic model for n-decane // *Combustion Science and Technology*. 2004. Vol. 177. Iss. 1. P. 89-106.
72. Zhukov V.P, Sechenov V.A., Starikovskii A.Yu. Autoignition of n-decane at high pressure // *Combustion and Flame*. 2008. Vol. 153. N1. P. 130-136.
73. Басевич В.Я., Беляев А.А. Сокращенная кинетическая схема для моделирования самовоспламенения воздушных смесей изооктана и н-гептана в течение периода индукции применительно к двигателям внутреннего сгорания // *Химическая физика*. 1994. Т. 13. № 8-9. С. 146-156.
74. Chen J.Y. Reduced reaction mechanisms for methanol-air diffusion flames // *Comb. Sci. and Tech*. 1991. Vol. 78. P. 127-145.
75. Aggarwal S.K. Ignition behavior of a dilute multicomponent fuel spray // *AIAA Paper*. 1988. N 0635. 9 p.
76. Rangel R.H., Sirignano W.A. Unsteady flame propagation in a two-dimensional spray with transient droplet vaporization // *AIAA Paper*. 1988. N 0641. 8 p.
77. Liang P.Y., Schuman M.D. Direct numerical simulation of the phase change and heat transfer of a vaporizing droplet // *AIAA Paper*. 1989. N 2432.
78. Madooglu K., Karagozian A.R. Burning of a spherical fuel droplet in a uniform flowfield with exact property variation // *Comb. and Flame*. 1993. Vol. 94. N 3. P. 321-329.
79. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2003. 352 с.
80. Басевич В.Я., Фролов С.М. Глобальные кинетические механизмы, используемые при моделировании многостадийного

самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // Химическая физика. 2006. Т. 25. №6. С. 54-62.

81. Frolov S.M., Basevich V.Ya., Neuhaus M.G., Tatshl R. // *Advanced Computation and Analysis of Combustion* .Moscow: ENAS Publ., 1997. P. 537.

82. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч.1.Основной химический процесс тепловыделения // Химическая физика. 1998. Т. 17. № 9. С. 112-128.

83. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч.2. Образование окиси азота // Химическая физика. 1998. Т. 17. № 10. С. 71-79.

84. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений. Ч.III. Промотирование горения // Химическая физика. 1999. Т.18. № 4. С. 67-74.

85. Евлампиев А. В., Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. «Глобальные» кинетические механизмы для моделирования турбулентных реагирующих течений. Часть IV: Диффузионное горение // Химическая физика. 2001. Т. 20. № 11. С. 21-27.

86. Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Радвогин Ю. Б. Моделирование стабилизации пламени в турбулентном потоке // Химическая физика. 1999. Т.18. №3. С. 86-99.

87. Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. Моделирование стабилизации диффузионного турбулентного пламени на плохообтекаемом теле // Химическая физика. 2001. Т.20. № 3. С. 79-88.

- 88.** Басевич В. Я., Фролов С. М., Посвянский В. С. Условия существования стационарной гетерогенной детонации // Химическая физика. 2005. Т. 24. №7. С.58-68.
- 89.** Frolov S. M., Basevich V.Ya., Belyaev A.A., Posvyanskii V.S., Smetanyuk V. A. Modeling of drop evaporation and combustion with regard for spray effects // Combustion and Pollution: Environmental Effect. Moscow, Torus Press, 2005. P. 117-132.
- 90.** Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. Моделирование распространения ламинарных пламен в двухфазных полидисперсных капельных средах // Химическая физика. 2003. Т.22. № 7. С. 55-59.
- 91.** Лебедев А. В., Окунь М. В., Баранов А. Е., Деминский М. А., Потапкин Б. В. Систематическая процедура упрощения кинетических механизмов химических процессов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 10. <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/335/>
- 92.** Pepiot P., Pitsch H. Systematic Reduction of Large Chemical Mechanisms // 4th Joint Meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute, Philadelphia, PA. 2005.
- 93.** Vajda S., Turanui T. Principal Component Analysis of Kinetic Models // Int J Chem Kinet. 1985.Vol. 17. P. 55-81.
- 94.** Glassmaker J. N. Intrinsic Low-Dimensional Manifold Method for Rational Simplification of Chemical Kinetics. 1999. <http://www.nd.edu/~powers/nick.glassmaker.pdf>
- 95.** Goussis D.A. On the Construction and Use of Reduced Chemical Kinetic Mechanisms Produced on the Basis of Given Algebraic Relations // Journal of Computational Physics. 1996. Vol. 128. P. 261-273.
- 96.** Valorani M., Creta F. A CSP-based skeletal mechanism generation

procedure: auto-ignition and premixed laminar flames in n-heptane/air mixtures // European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD. 2006.

97. Valorani M., Creta F. An automatic procedure for the simplification of chemical kinetic mechanisms based on CSP // Combustion and Flame. 2006. Vol.146. P. 29–51.

98. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т.- М.: Наука, 1979-1982.

99. Гурвич Л.В. ИВТАНТЕРМО - автоматизированная система данных о теплофизических свойствах веществ // Вестник АН СССР. 1983. № 3. С. 54-65.

100. Марасанов А.М., Мусин В.Р., Пирумов У.Г., Прохоров М.Б. Пакет прикладных программ химической кинетики: архитектура и адаптация для ПЭВМ // Матер. Междунар. симпоз.: Сб. докл. Минск: Изд-во БелНИИТМ 1989. Т. 2. С. 672-678.

101. Алемасов В.Е., Дрегалнн А.Ф., Тишин А.П., Худяков В. А. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочное издание: В 10-и т.- М.: ВИНТИ, 1971-1980.

102. Блошенко В.Н., Мержанов А.Г., Перегудов Н.И. Хайкин Б.И. К теории газофазного воспламенения капли // Горение и взрыв. М.: 1972. С. 227-233.

103. Прудников А.Г., Волынский М.С., Сагалович В.Н. Процессы смесеобразования и горения в воздушно-реактивных двигателях. М.: Машиностроение, 1971. 355 с.

104. Фукс Н.А. Испарение и рост капель в газообразной среде. М.: Изд-во АН СССР, 1954. 92 с.

- 105.** Law C.K. Recent advances in droplet vaporization and combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1982. Vol. 8. N 3. P. 171-201.
- 106.** Лоу К.К., Лоу Х.К. Закон d^2 для испарения и горения многокомпонентной капли // Ракетная техника и космонавтика. 1982. № 5. С. 51-58.
- 107.** Davis E.J., Ray A.K. Submicron droplet evaporation in the continuum and non-continuum regimes // J.Aerosol Sci. 1978. V. 9. P. 411-422.
- 108.** Шевцов В.И. Испарение веществ в окислительную среду // Физика горения и взрыва. 1985. N 6. С. 62-67.
- 109.** Ивченко И.Н. Об одном методе решения граничных задач переноса при произвольных числах Кнудсена // Изв. АН СССР. МЖГ. 1986. № 3. С. 182 - 185.
- 110.** Young J.B. The condensation and evaporation of liquid droplets at arbitrary Knudsen number in the presence of an inert gas // Int.J.Heat Mass Transfer. 1993. Vol. 36. N 11. P. 2941-2956.
- 111.** Козырев А. В., Ситников А. Г. Испарение сферической капли в газе среднего давления // УФН. 2001. Т. 171. № 7. С. 765-774.
- 112.** Антонникова А.А., Коровина Н.В., Кудряшова О.Б. Васенин И.М. Физико-математическая модель испарения капель мелкодисперсных аэрозолей // Ползуновский вестник. 2013. №1. С. 123-126.
- 113.** Стрижак П.А., Волков Р.С., Забелин М.В., Курисько А.С. Особенности испарения одиночных и полидисперсного потока капель воды в высокотемпературной газовой среде // Фундаментальные исследования. 2014. № 9-2. С. 307-311.
- 114.** Izoda, Kumagai, Problems in Combustion. Material from the VI and VII International Symposia on Combustion, Moscow, 1963.

- 115.** Блошенко В.Н., Мержанов А.Г., Перегудов Н.И., Хайкин Б.И. Формирование нестационарного диффузионного фронта горения при воспламенении капли жидкого топлива // Физика горения и взрыва. 1973. № 2. С 211-220.
- 116.** Беллан , Саммерфилд Модель для изучения нестационарного горения капли // Ракетная техника и космонавтика. 1977. N 2. С. 127-137.
- 117.** Waldman C.H. Theory of non-steady state droplet combustion // 15th Symp. (Int.) on Combustion. 1974. P. 429-430.
- 118.** Janssen R.D., O'Rourke P.J. Using computers to answer fundamental questions in combustion theory: an example from droplet combustion // Lect. in Applied Math. 1986. Vol. 24. P. 437-457.
- 119.** Алексеев Б.В., Гришин А.М. Физическая газодинамика реагирующих сред. М.: Высш. Шк., 1985. 464 с.
- 120.** Либерман М.А., Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Кузнецов М., Рахимова Т.В., Чукаловский А.А. О механизме перехода медленного горения в детонацию в водород-кислородной // ЖЭТФ. 2010. Т. 138. № 4. С. 772-778.
- 121.** Dabora E. K., Weinberger L.P. Present Status of Detonations in Two-Phase Systems // Acta Astronautica. 1974. Vol. 1. P. 361-372.
- 122.** Nichols J., Sichel M., Dry T. Theoretical and Experimental Study of Cylindrical Shock and Heterogeneous Detonation Waves // Ibid. 1974. Vol. 1. P. 385-404.
- 123.** Borisov A.A., Gelfand B.E. Review of Papers on Detonation of Two-Phase Systems // Archive of Thermodynamics and Combustion. 1976. Vol. 7. N 2. P. 273-287.
- 124.** Dabora E.K. Fundamental Mechanisms of Liquid Spray Detonations

// Proceedings of the International Conference on Fuel-Air Explosions. University of Waterloo Press, Montreal, Canada, 1982. P. 245-264.

125. Sichel M. The Detonation of Sprays: Recent Results // Proceedings of the International Conference on Fuel-Air Explosions. University of Waterloo Press, Montreal, Canada, 1982. P. 265-301.

126. Lu P.L., Slagg N., Fishburn B.D. Relation of Chemical and Physical Processes in Two Phase Detonations // Acta Astronautics. 1979. Vol. 6. P. 815.

127. Bull D.C., McLeod M.A., Mizner G.A. Detonation of Unconfined Fuel Aerosols // Gasdynamics of Detonations and Explosions. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA Inc., 1981. Vol. 75. P. 48-60.

128. Солоухин Р.И. Методы измерения и основные результаты в экспериментах на ударных трубах. Новосибирск: Наука, 1969.

129. Vojcehovskij B.V., Mitrofanov V.V., Topchijan M.E. Struktura fronta detonacii v gazah, Novosibirsk, Izd-vo SO AN SSSR, 1963.

130. Быковский Ф.А., Ждан С.А. Непрерывная спиновая детонация // Рос.акад.наук, Сиб. отд-ние, Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2013. 423 с.

131. Булат П. В., Упырев В. В. Детонация и ее инициирование - история экспериментального, теоретического и численного исследования // Технические науки - от теории к практике: сб. ст. по матер. XLVIII-XLIX междунар. науч.-практ. конф. Новосибирск: СибАК, 2015. № 7-8.С.44.

132. Зельдович Я.Б. О распределении давления и скорости в продуктах детонационного взрыва, в частности, при сферическом распространении детонационной волны // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1942. Т. 12. № 9. С. 389-406.

- 133.** Гриб А.А. Влияние места инициирования на параметры воздушной ударной волны при детонации взрывчатых газовых смесей // Прикладная математика и механика. 1944. Т. 8. Вып. 4. С. 273-286.
- 134.** Бам-Зеликович Г.М. Распад произвольного разрыва в горючей смеси // Теоретическая гидромеханика. М.: Оборонгиз, 1949. № 4. С. 112-141.
- 135.** Пухначев В.В. Об устойчивости детонации Чепмена-Жуге // Доклады АН СССР. 1963. Т. 149. № 4. С. 798-801.
- 136.** Коробейников В.П., Левин В.А. Сильный взрыв в горючей смеси газов // Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. 1969. № 6. С. 48-51.
- 137.** Korobeinikov V.P., Levin V.A., Markov V.V., Chernyi G.G. Propagation of blast waves in a combustible gas // Acta Astronautica. 1972. Vol. 17. № 5-6. P. 529-537.
- 138.** Николаев Ю.А., Топчиян М.Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13. № 3.
- 139.** Васильев А.А., Топчиян М.Е., Ульяницкий В.Ю. Влияние начальной температуры на параметры газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15. № 6. С. 149.
- 140.** Марков В.В. Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // Доклады АН СССР. 1981. Т. 258. № 2. С. 158-163.
- 141.** Васильев А.А., Митрофанов В.В., Топчиян М.Е. Детонационные волны в газах // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23. № 5. С. 109.
- 142.** Нетлетон М. Детонация в газах. М.: Мир, 1989. 278 с.

143. Старик А.М., Даутов Н.Г. О механизмах ускорения детонационного горения смесей H_2 +воздух за ударными волнами при возбуждении молекулярных колебаний исходных реагентов // ДАН. 1996. Т.350. №6. С.757.

144. Левин В.А., Смехов Г.Д., Тарасов А.И., Хмелевский А.Н. Расчетное и экспериментальное исследование пульсирующей детонации в модели двигателя // Препринт ИМ МГУ. 1998. № 42.

145. Баженова Т.В., Голуб В.В. Использование газовой детонации в управляемом частотном режиме (обзор) // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 4. С. 3-21.

146. Николаев Ю.А., Васильев А.А., Ульяницкий В.Ю. Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 4. С. 22-54.

147. Lu T., Law C.K., Ju YG. Some Aspects of Chemical Kinetics in Chapman-Jouguet Detonation: Induction Length Analysis // Journal of Propulsion and Power. 2003. Vol. 19. N. 5. P. 901-907.

148. Туник Ю.В. Численное моделирование детонационного горения водородовоздушных смесей в сопле Лавалья // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2010. № 2. С.107-114.

149. Хмель Т. А., Федоров А. В Особенности детонации в полидисперсных газовзвесьях // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4 (3). С. 1232-1234.

150. Семенов И.В., Уткин П.С. Численное моделирование детонационных процессов в газах // М.: Учреждение Российской академии наук Институт автоматизации проектирования РАН, 2011.69 с.

151. Левин В. А. Инициирование, распространение и срыв детонации в газах // Вестник ННГУ. 2011. №4-3. С.925-927.

152. Zabelinskii I.E., Ibraguimova L.B., Shatalov O.P., Tunik Yu V. Experimental study and numerical modeling of vibrational oxygen temperature profiles behind a strong shock wave front // Progress in Flight Physics. 2012. Vol.3. P.231-242.

153. Павлов В.А., Туник Ю.В. Детонационное горение водорода в сопле Лавалья в условиях разреженной атмосферы в журнале // Механика жидкости и газа. 2012. № 5. С.99-106.

154. Бивол Г.Ю., Головастов С.В., Голуб В.В. Распространение детонационной волны в водородно-воздушных смесях в канале со звукопоглощающей поверхностью // В книге: XL Академические чтения по космонавтике посвященные памяти академика С.П. Королёва и других выдающихся отечественных ученых – пионеров освоения космического пространства: сборник тезисов. 2015. С. 118-119.

155. Головастов С.В., Бивол Г.Ю., Голуб В.В. Многоступенчатая детонация в метано-кислородных смесях // В книге: XL Академические чтения по космонавтике посвященные памяти академика С.П. Королёва и других выдающихся отечественных ученых – пионеров освоения космического пространства: сборник тезисов. 2015. С. 122-123.

156. Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Численное моделирование гетерогенной детонации в осесимметричном канале с разрывом сечения // Материалы 19 международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), посвящ. памяти У. Г. Пирумова, Алушта, 24–31 мая, 2015 г. – Москва : Изд-во МАИ, 2015. С. 472–474.

157. Щелкин К.И. Неустойчивость горения и детонации газов // УФН. 1965. № 87. С.273–302.

158. Щелкин К.И. К теории возникновения детонации в газовых

смесь в трубах // Доклады АН СССР. 1939. Т. 23. С. 636.

159. Щелкин К.И. Влияние шероховатости трубы на возникновение и распространение детонации в газах // ЖЭТФ. 1940. Т. 10. С. 823.

160. Соколик А.С. О механизме преддетанационного ускорения пламени // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. С.1172.

161. Щелкин К.И, Трошин Я.К. Газодинамика горения, М.:Наука, 1965.

162. Fickett W., Davis W.C. Detonation. University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London, 1979. 386 p.

163. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Лобань С.А., Маилков А.Е., Хомик С.В. Исследование пределов детонации топливно-воздушных смесей в гладких и шероховатых трубах // Хим. Физика. 1982. №6. С.848.

164. Hasson A., Burcat A. Deflagration to Detonation Transition in Propylen Oxide- Oxigen mixtures // Comb. Sci. Tech. 1983. Vol. 33. P. 215.

165. Liu Y.K., Lee J.H.S., Knystautas R. Effect of Geometry on the Transmittion of Detonation Through an Orifice // Comb and Flame. 1984. Vol. 56. N 2. P. 215.

166. Shepherd, J.E. Chemical Kinetics of Hydrogen-Air-Diluent Detonations // Proceedings of the 10th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Berkeley, CA, 1985.P. 1-72.

167. Васильев А.А. Оценка критических условий перехода горения в детонацию // Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42. № 2. С. 91-96.

168. Фролов С.М., Аксенов В.С. Переход горения в детонацию в керосино-воздушной смеси // Доклады академии наук. 2007. Т. 416. № 3.С. 261.

169. Васильев А.А. Оптимизация перехода горения в детонацию // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48. № 3. С. 25-34.

170. Бакланов Д.И., Голуб В.В., Иванов К.В., Кривокорытов М.С. Переход горения в детонацию в канале с диаметром меньше критического диаметра существования стационарной детонации // Теплофизика высоких температур. 2012. Т. 50. № 2. С. 258.

171. Головастов С.В., Микушкин А.Ю., Голуб В.В. Переход горения в детонацию в криволинейном канале // В книге: XL Академические чтения по космонавтике посвященные памяти академика С.П. Королёва и других выдающихся отечественных ученых – пионеров освоения космического пространства: сборник тезисов. 2015. С. 119-120.

172. Голуб В.В. Переход горения в детонацию в каналах, диаметр которых меньше критического диаметра распространения стационарной детонации // В сборнике: XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики сборник докладов. 2015. С. 983-985.

173. Lees F. P ., Mannan S. Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment and Control. Butterworth-Heinemann. 2004.

174. Lee J. H. S. Explosion Problems for Hydrogen Safety // Proc. of the School on Hydrogen Safety, Belfast, Ireland. 2006 (Lee J. H. S Comments on explosion problems for hydrogen safety // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2008. Vol. 21. Iss. 2.P. 136–146.

175. Фролов С.М Импульсные детонационные двигатели. Горюс Пресс, Москва, 2006.

176. Zerdovich Ya. B. Regime classification of an exothermic reaction

with nonuniform initial conditions // *Combustion and Flame*.1980.Vol.39.Iss.2. P. 211-214.

177. Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н., Фролов С.М., Цыганов С.А. К вопросу о возникновении детонации в неравномерно нагретой газовой смеси // *Физика горения и взрыва*. 1985. Т. 21. №4. С. 118-123.

178. Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н., Фролов С.М., Цыганов С.А. О возникновении детонации в системах с неоднородным распределением температуры и концентрации // *Хим.Физика*. 1986. Т.5. №9. С. 1277-1284.

179. Гельфанд Б.Е., Фролов С.М., Цыганов С.А. Самопроизвольное возбуждение ударных и детонационных волн при расширении реагирующих сред // *Фундаментальные проблемы физики ударных волн*. Черноголовка. 1987. Т. 1.ч.1. С. 144.

180. Махвиладзе Г. М., Рогатых Д. И. Начальные неоднородности температуры и концентрации - причина взрывного протекания химической реакции в горючем газе, М.:Препринт ИПМ АН СССР, 1988. № 321. 41 с.

181. Гельфанд Б.Е., Сильников М.В. Газовые взрывы. Санкт-Петербург, 2007.

182. Гельфанд Б.Е., Сильников М.В. Объемные взрывы. Санкт-Петербург, 2008.

183. Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Михалкин В.Н., Шаргатов В.А. Расчет параметров ударных волн при детонации горючих газообразных смесей переменного состава // *Физика горения и взрыва*. 1985. № 3. С. 92.

184. Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Хомик С.В. Термогазодинамика горения и взрыва водорода. - Изд. Политехнического ун-та, 2009.

- 185.** Барановский С. И., Надворский А. С., Турищев А. И. Двумерная модель горения углеводородных топлив в сверхзвуковом потоке // Физика горения и взрыва. 1992. №4. С. 32-36.
- 186.** Фёдоров А. В. Математическое моделирование воспламенения облака микрокапель углеводородного топлива // Физика горения и взрыва. 2002. Т.38. №5. 97-100.
- 187.** Liew K. H., Urip E., Yang S. L., Marek C. J. An Interactive Microsoft (registered tm) Excel Program for Tracking a Single Evaporating Droplet in Crossflow // NASA Technical Reports Server (NTRS). 2004.
- 188.** Ковалева Л.А., Киреев В.Н., Мусин А.А. Моделирование процессов тепло- и массопереноса в углеводородной жидкости при индукционном нагреве // Прикладная механика и техническая физика. 2009. Т. 50. № 1. С. 95-100.
- 189.** Franzelli B., Riber E., Sanjose M., Poinot T. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames // Combustion and Flame. 2010. Vol. 157. Iss.7. P. 1364-1373.
- 190.** Шушков С.В., Генарова Т.Н., Лещевич В.В., Пенязьков О.Г., Гусакова С.В., Егоров А.С., Говоров М.И., Присмотров Ю.А. Повышение скорости горения топлива при добавлении углеродных наноразмерных частиц // Инженерно-физический журнал. 2012 Т. 85. №4. С.797-803.
- 191.** Бортников Л. Н. Особенности горения бензоводородовоздушной смеси в цилиндре поршневого двигателя внутреннего сгорания и определение оптимального соотношения бензин - водород // Физика горения и взрыва .2007. Т.43. № 4. С. 8-15.
- 192.** Баев В. К., Бажайкин А. И., Болдырев И. В., Бузуков А. А., Терентьев В. А., Тимошенко Б. П. Задержка воспламенения бензина при впрыске в модель камеры сгорания двигателя // Физика горения и взрыва. 1981. № 2. С. 28-35.

- 193.** Dooley S., Won S. H., Chaos M., Heyne J., Ju Y., Dryer F. L., Kumar K., Sung C. J., Wang H., Oehlschlaeger M. A., Santoro R. J., Litzinger T. A. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties // *Combustion and Flame*. 2010. Vol. 157. Iss. 12. P. 2333–2339.
- 194.** Shepherd J. E., Krok C., Lee J.J., Spark ignition energy measurements in Jet A // Graduate Aerospace Laboratories, California Institute of Technology(GALCIT report).1999. (FM97-9).
- 195.** Massoli P., Lazzaro M., Beretta F., D'Alessio A. Report on Research Activities and Facilities. Ed. Di Lorenzo A. Napoli: Istituto Motori C.N.R., 1993. P. 36.
- 196.** Atthasit A., Doue N., Biscos Y., Lavergne G., Berlemont A. Influence of drop concentration on the dynamics and evaporation of a monodisperse stream of drops in evaporation regime // In: *Combustion and Atmospheric Pollution*. Ed. by G. D. Roy, S. M. Frolov, and A. M. Starik. Moscow: Torus Press, 2003. P. 214-219.
- 197.** Takei M., Kobayashi H., Niioka T. Ignition experiment of a blended fuel droplet in a microgravity field // *Int. J. Microgravity Res. Appl. Microgravity Sci. Technol.*, 1993. Vol. VI. No.3. P. 184-187.
- 198.** Niioka T., Kobayashi H., Mito D. Ignition experiment on droplet array in normal and microgravity environments // *IVTAM Symp. Mechanics and Combustion of Droplet and Sprays Proc. Tainan*, 1994. P. 367-377.
- 199.** Соколик А. С., Басевич В. Я. Задержки самовоспламенения моторных топлив // *ЖФХ*. 1954. Т. 28. № 11. С. 1935.
- 200.** Tanner F. X. A cascade atomization and drop breakup model for the simulation of high-pressure liquid jets // *SAE Techn. Paper Series*, 2003.№ 011044.

- 201.** Ананьев А.В., Борисов Д.М., Лаптев И.В. Моделирование горения углеводородного топлива в сверхзвуковых потоках в каналах сложной формы // Вестник Московского авиационного института. 2011. Т. 18. № 5. С. 42-48.
- 202.** Ананьев А.В., Борисов Д.М., Лаптев И.В., Роцин А.С. Моделирование эффективности процессов горения топлива в до – и сверхзвуковых потоках в каналах энергоустановок сложной формы // Известия Российской академии наук. Энергетика. 2012. № 4. С. 117-125.
- 203.** Коротеев А.С., Лебединский Е.В. Рабочие процессы в жидкостном ракетном двигателе и их моделирование. Машиностроение, 2008. 511 с.
- 204.** Ле Д. Л., Бай Х. Ч., Мишунин А. А. , Старов А. В. Исследование горения жидкого и газообразного топлив в сверхзвуковой камере сгорания// Физика горения и взрыва. 2003. Т.39, № 3. С. 58–66.
- 205.** Dagaut P., Cathonnet M. The ignition, oxidation and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling // Progress in Energy and Combustion Science. 2006. Vol. 32. P. 48 - 92.
- 206.** Левин В. А., Смехов Г. Д., Хмелевский А. Н. Моделирование равновесного сгорания керосина смесью газообразных углеводородов // Физика горения и взрыва. 2007. Т.43. №4. С. 3-7.
- 207.** Frassoldati A., Cuoci A., Faravelli T., Ranzi E. Global kinetic mechanism of kerosene combustion for CFD applications // Proceedings of the European Combustion Meeting, Cardiff (UK), 2011.
- 208.** Федоров А. В., Тропин Д.А. Математическая модель детонационного сгорания пара керосина в окислителе // Физика горения и взрыва. 2012. Т.48. № 1. С. 47-54.
- 209.** Zhukov V., Starikovskiy A., Sechenov V. Ignition Delay Times of Jet-A/Air Mixtures // AIAA Paper. 2012. N 501.

210. Gebel G. C., Mosbach T., Meier W., Aigner M. Experimental Investigations of the Ignition and Flame Stabilization of a Full Cone Kerosene Spray in a Lab-scale Model Combustor // 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, ICLASS, 2012.

211. Ягодников Д. А., Бенуа Ж. Математическое моделирование испарения и горения капель керосина в камере сгорания жидкостного ракетного двигателя с использованием плотности распределения вероятности // Инженерный вестник (МГТУ им. Н.Э.Баумана). Электронный журнал .2014 .№ 9. <http://engbul.bmstu.ru/doc/738400.html>.

212. Кулик М. И. Прогрев и испарение капель жидкого топлива в потоке нагретого воздуха // Вестник ХНАДУ. 2007. №38.

213. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C1–C10 к C11–C16 // Химическая физика. 2013. Т. 32. № 4. С. 1 - 10.

214. Беляев А.А., Басевич В.Я., Фролов С.М. База данных для расчета ламинарного и турбулентного горения воздушных смесей авиационного керосина // Горение и взрыв. 2015. Т. 8. № 1. С. 29-36

215. Пирумов У.Г.. Математическое моделирование в проблемах охраны воздушного бассейна.- М.: Изд-во МАИ, 2001.340 с.

216. Гидаспов В.Ю., Карпов А.А. Численное исследование динамики аэрозоля в задаче о загрязнении верхней атмосферы // Математическое моделирование. 1999. Т.11. №2. С. 65-73.

217. Гидаспов В.Ю., Стрельцов В.Ю. Исследование влияния капель распыленной воды на воспламенение и детонацию водородо-воздушной смеси // Математическое моделирование. 2004. Т. 16. № 6. С.123-126.

218. Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Стрельцов В.Ю.

Численное моделирование течений реагирующих газочапельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола // ТВТ. 1998. Т. 36. № 3. С. 424-434.

219. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом // Электронный журнал «Труды МАИ». 2013. № 66. <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=40233>

220. Мосолов С.В., Сидлеров Д.А., Пономарев А.А. Сравнительный анализ особенностей рабочего процесса в камерах сгорания ЖРД со струйно-струйными и струйно-центробежными форсунками на основе численного моделирования // Электронный журнал «Труды МАИ». 2012. №59.

221. Сидлеров Д. А., Пономарев А. А. Численное моделирование режимов испарения и горения капельных струй топлива в камерах сгорания жидкостных ракетных двигателей // Электронный журнал «Труды МАИ». 2014. № 77.

222. Гардинер У. мл., Диксон-Льюис Г., Целнер Р. Химия горения. М.: Мир, 1988. 461 с.

223. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 592 с.

224. Волков В.А., Мусин В.Р., Прохоров М.Б. Расчет температуры и равновесного состава продуктов сгорания при заданных плотности и внутренней энергии смеси // Сборник научных трудов - Москва, МАИ, 1983, с. 62-67.

225. Гидаспов В.Ю. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе // Математическое моделирование. 2006. Т. 18. №. 8. С. 64-76.

226. Westbrook C.K., Dryer F.L. A Comprehensive mechanism for methanol oxidation // Comb. Sci. and Tech. 1979. V. 20. P. 125-140.

227. Теплофизические свойства некоторых авиационных топлив в жидком и газообразном состояниях / Сборник статей под ред. Варгафтика Н.Б. М.: Оборонгиз, 1961. 162 с.

228. Дубовкин Н. Ф. Справочник по углеводородным топливам и их продуктам сгорания. М.-Л. Госэнергоиздат, 1962. 288 с.

229. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Физматгиз, 1963, 708с.

230. Жоров Ю. М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. М.: Химия, 1978. 376с.

231. Большаков Г. Ф. Физико-химические основы применения топлив и масел. Новосибирск: Наука, 1987. 209с.

232. Дрегалин А.Ф., Зенуков И.А., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергоустановках / Под ред. В.Е. Алемасова. Казань: Изд-во Казанского университета, 1985. 263 с.