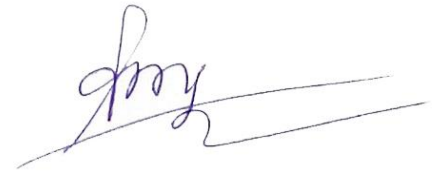


*На правах рукописи*



**Зыонг Минь Дык**

**ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОФАЗНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ  
РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

Специальность 1.1.9. – Механика жидкости, газа и плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Москва – 2022

Работа выполнена на кафедре «Вычислительная математика и программирование» Московского авиационного института (национального исследовательского университета).

**Научный руководитель:** **Гидаспов Владимир Юрьевич**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

**Официальные оппоненты:** **Голуб Виктор Владимирович**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физической газовой динамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур РАН.

**Острик Афанасий Викторович**, доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник Лаборатории уравнений состояния вещества Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН.

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского Российской академии наук

Защита состоится «29» декабря 2022 г. в 10 часов 00 минут на заседании диссертационного совета 24.2.327.08 Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4 или на сайте МАИ по ссылке: [https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT\\_ID=168923](https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=168923)

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4, отдел ученого и диссертационных советов.

Ученый секретарь диссертационного  
совета 24.2.327.08, д.ф.-м.н., с.н.с.



В.Ю. Гидаспов

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** В связи с созданием различных энергетических и технологических установок, исследованием детонации, атмосферными явлениями и т.д. в России и за рубежом проводятся интенсивные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования многофазных высокотемпературных реагирующих течений, в которых заметное внимание уделяется происходящим в них химическим превращениям. Одним из наиболее часто используемых методов исследования является термодинамический метод моделирования химически реагирующих систем.

В настоящее время крайне важна работа над расширением возможностей применения термодинамического метода при постановке и решении научно-технических задач, в т.ч. исследование многофазных высокотемпературных реагирующих течений, при которых без учета химически реагирующих процессов невозможно получить достоверные результаты. Развитие вычислительной техники в настоящее время позволяет усложнять имеющиеся модели и исследовать все более тонкие аспекты высокоэнергетических течений. Используемые алгоритмы и вычислительные модели должны обеспечивать выполнение законов сохранения и начал термодинамики, гарантировать переход изучаемой системы в состояние термодинамического равновесия, при условии не уменьшения энтропии.

**Цель диссертационной работы** состоит в том, чтобы построить и апробировать физико-математическую и вычислительную модели течений многокомпонентного газа с учетом протекания равновесных химических превращений и образования конденсированных компонентов, обеспечивающую непрерывный переход от модели совершенного газа к реальному.

### **Задачами исследования являются:**

- построение вычислительной модели для расчета равновесного состава многокомпонентной смеси совершенных газов при заданных парах термодинамических величин, а также равновесных ударных адиабат и изоэнтропических течений, с учетом возможного образования конденсированных компонентов.

- построение вычислительной модели для расчета равновесного состава многокомпонентной смеси газов, описываемых термическим уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения (модель реального газа) при заданных парах термодинамических величин, а также равновесных ударных адиабат и изоэнтропических течений, с учетом возможного образования конденсированных компонентов.

- проведение верификации и валидации моделей равновесных расчетов путем решения тестовых задач, сравнением с результатами других авторов и экспериментальными данными; определение областей применимости моделей совершенного и реального газов.

- разработка вычислительного алгоритма решения задачи о распаде разрыва в горючем газе для случаев, когда продукты сгорания описываются моделями совершенного и реального газов и являются термодинамически равновесными.

**Методы исследования.** Основным методом исследования является математическое моделирование.

**Научная новизна и практическая значимость работы.** В диссертационной работе получены следующие новые результаты:

- разработаны вычислительные модели для расчета равновесного состава многокомпонентной смеси газов, описываемой термическим уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения, при заданных парах термодинамических величин, а также равновесных ударных адиабат и изоэнтروпических течений, с учетом возможного образования конденсированных компонентов.

- выявлено влияние вида уравнения состояния, описывающего исходную смесь и продукты сгорания на достигаемые термодинамически равновесные параметры при расчете детонационных адиабат, параметров детонации Чепмена-Жуге для смесей водород-кислород, метан-кислород-азот-инертный газ и изоэнтропических равновесных течений.

- разработан вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва для случая, когда слева и справа от начального разрыва и результирующего контактного разрыва газовая смесь может быть, как замороженная, так и равновесная и описываться как уравнением состояния совершенного газа, так и реального.

- получены количественные характеристики, описывающие влияние уравнения состояния продуктов сгорания на реализующиеся при решении задачи о распаде произвольного разрыва параметры течения, для газовых пар: гелий – смесь водорода с кислородом, аргон – смесь метана с воздухом.

#### **Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Физико-математическая и вычислительная модели для расчета равновесного состава многокомпонентной многофазной смеси, для случая, когда газовая фаза описывается термическим уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения при заданных парах термодинамических величин, а также равновесных ударных адиабат и изоэнтропических течений.

2. Количественные оценки влияния вида уравнения состояния, описывающего исходную газовую смесь и продукты сгорания на достигаемые термодинамически равновесные параметры при расчете детонационных адиабат, параметров детонации Чепмена-Жуге для смесей водород-кислород, метан-кислород-азот-инертный газ и равновесных изоэнтропических течений.

3. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва для случая, когда слева и справа от начального разрыва и результирующего контактного разрыва газовая смесь может быть, как замороженная, так и равновесная и описываться как уравнением состояния совершенного газа, так и уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения.

4. Количественные характеристики, описывающие влияние уравнения состояния продуктов сгорания на реализующиеся при решении задачи о распаде

произвольного разрыва параметры течения, для газовых пар: гелий – смесь водорода с кислородом, аргон – смесь метана с воздухом, для случая равновесного состояния продуктов сгорания.

**Достоверность** обеспечивается строгостью используемых математических постановок и физико-математических моделей, устойчивостью и сходимостью применяемых численных методов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также согласованием результатов численного моделирования с результатами экспериментальных и расчетно-теоретических исследований других авторов.

**Апробация результатов исследования** осуществлена в публикациях, докладах и выступлениях на следующих конференциях: XXI – XXII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (Алушта, 2019, 2021 гг), XIII-XIV международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (Алушта, 2020, 2022 гг), XIX Международные конференции «Авиация и космонавтика» (Москва, 2020).

**Публикации.** Основные положения диссертационного исследования опубликованы в 10 печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК и в международные реферативные базы данных.

**Вклад автора** заключается в разработке физико-математической и вычислительной моделей, проведении расчетно-теоретических исследований и анализе полученных результатов.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем работы составляет 128 страниц, включая 47 рисунков и 13 таблиц. Список литературы содержит 126 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы концепция и основные положения диссертационной работы, показана научная новизна и практическая значимость результатов. Изложены основные положения, выносимые на защиту, приводится список публикаций и сведения об апробации работы. Приводятся обзор литературы и история развития исследования процессов, протекающих в сверхзвуковых реагирующих течениях с ударными и детонационными волнами.

В **первой главе** приведено описание используемой в работе физико-математической модели, описывающей термодинамическое равновесное состояние для совершенного газа на основе принципа экстремума химических потенциалов.

Химический состав системы выражается числом молей  $\gamma_i$ , состоит из газовой фазы, включающей в себя  $N$  веществ ( $i=1,2,\dots,N$ ), и  $L$  конденсированных фаз ( $l=N+1,N+2,\dots,N+L$ ). Общий вектор химических концентраций обозначается  $\vec{\gamma} = (\gamma_1, \dots, \gamma_N, \gamma_{N+1}, \dots, \gamma_{N+L})$ . Модель включает в себя условие экстремума химических потенциалов, законы сохранения химических элементов, уравнение состояния совершенного газа, условие электронейтральности:

$$R \ln \frac{RT\gamma_i}{p_0\nu} + \frac{G_i^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i - \lambda_e A_e^i = 0, i=1, \dots, N \quad (1)$$

$$\left( \frac{G_l^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l \right) \gamma_l = 0, l = N+1, \dots, N+L \quad (2)$$

$$p\nu = \gamma RT \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^{N+L} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, K=1, \dots, N_e, \quad \gamma_i > 0, i=1, \dots, N, \quad \gamma_i \geq 0, i=N, \dots, N+L \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^N A_e^i \gamma_i = 0 \quad (5)$$

Здесь,  $T$  – температура,  $p$  – давление,  $\nu$  – удельный объем,  $G^0(T)$  – температурная часть потенциала Гиббса,  $\lambda_K, \lambda_e$  – неопределенные множители функции Лагранжа,  $A_K^i$  – количество атомов  $k$ -ого элемента в  $i$ -ом веществе;  $\gamma_k^0$  – заданная мольно-массовая концентрация  $k$ -ого элемента,  $\gamma$  – суммарное число молей в газовой фазе,  $A_e^i$  – электрический заряд  $i$ -го вещества,  $p_0=101325 \text{ Па}$ ,  $T_0=298,15 \text{ К}$ ;  $R=8,3144 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К}$  – универсальная газовая постоянная.

Наличие в равновесном составе конденсированной фазы существенно усложняет разработку эффективного алгоритма для расчета равновесного состава. В работе предлагается осуществлять расчет в два этапа. На первом этапе воспользоваться методом, больших молекул, предложенным В. А. Худяковым. В соответствии с которым конденсированная фаза моделируется газом, каждая молекула которого включает  $B$  молекул, из которых состоит конденсированная фаза, с соответствующим изменением термодинамических свойств и матрицы состава и, соответственно, уравнения (2) заменяются на соотношения, аналогичные:

$$\gamma_l = \exp\left(-\frac{BG_l^0(T)}{T} + B \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l\right), l = N+1, \dots, N+L, B \sim 1000 \quad (6)$$

Уравнения (1)-(5) образуют систему из  $N+L+N_e+2$  уравнений для решения которой дополнительно должно быть задано два термодинамических параметра. Этими параметрами могут быть любые величины из числа тех, что известны по условиям постановки общей проблемы моделирования. Выбор задаваемых характеристик обусловлен только удобством описания условий равновесия системы с окружающей средой. Равновесие может задаваться не только значениями традиционных пар параметров ( $p, T$ ) или ( $\nu, T$ ), но и другими комбинациями. Например, при определении параметров горения топливных смесей в заданном объеме может быть удобным задание состояния равновесия с помощью удельной внутренней энергии ( $U$ ) и удельного объема ( $\nu$ ). Для расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив, удобно задавать давление  $p$ , при котором осуществляется процесс сгорания и коэффициент избытка окислителя воздуха  $\alpha$ , по которым можно найти суммарную энтальпию системы  $H_K$ . Расчет характеристик адиабатического истечения продуктов сгорания из сопла удобно моделировать, задавая  $S$  и  $p$ .

Система уравнений (1)-(5) является нелинейной. Для поиска ее решения целесообразно использовать метод Ньютона с параметрами релаксации. Суть метода заключается в линеаризации исходной системы уравнений с использованием разложения в ряд Тейлора относительно начального приближения решения  $\vec{x}^0$ :

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^0) \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) \quad (7)$$

При реализации вычислительных алгоритмов необходимо обратить внимание на то, что для конденсированных фаз термодинамические функции  $H_i^0(T)$ ,  $S_i^0(T)$ ,  $C_{p_i}(T)$  терпят разрыв при температуре фазового перехода  $T_p$  (химический потенциал при этом остается непрерывной функцией). Из-за этого во многих случаях при переходе значения температуры через точку  $T=T_p$  происходит нарушение монотонного хода итерационного процесса, что может привести к несходимости алгоритма. Данные о термодинамических, термохимических и теплофизических свойствах компонентов, входящих в состав продуктов сгорания, были заимствованы из справочного издания <sup>1</sup>.

В результате термодинамического моделирования определяются значения следующих параметров системы: температура  $T$  (К), давление  $p$  (МПа, Па), удельный объем  $v$  (м<sup>3</sup>/кг), плотность  $\rho$  (кг/м<sup>3</sup>), газовая постоянная  $R$  (Дж/(кг.К)), внутренняя энергия  $U$  (кДж/кг), энтальпия  $H$  (или  $I$ ) (кДж/кг), энтропия  $S$  (Дж/(кг.К)), число молей  $M$  (моль/кг), молярная масса  $MM$  (г/моль), доля конденсированных веществ  $z$ , теплоемкости  $C_p$ ,  $C_v$  (кДж/(кг.К)), показатели адиабаты  $k$ , изобарический коэффициент объемного расширения  $\alpha_p$ , изохорический термический коэффициент давления  $\beta_v$ , изотермическая сжимаемость  $\gamma_T$ , скорость звука  $a$  (м/с), химический состав системы  $\vec{\gamma}$ , стехиометрическое соотношение компонентов ( $K_{m0}$ ) и коэффициент избытка окислителя  $\alpha$  (для двухкомпонентных топлив).

Для верификации производилось большое количество расчетов для различных химических систем при разных условиях [1,5]. Было получено, что результаты численного моделирования с высокой точностью совпадают с результатами расчетов с использованием ряда известных программ, получивших широкое распространение в РФ, таких, как АСТРА, Terra, Real.

С помощью разработанного алгоритма были проведены расчеты параметров продуктов сгорания керосина (брутто-формула  $C_{H_{1,956}}$ ; энтальпия – -1947,9 кДж/кг) в воздухе (брутто-формула  $N_{53,91}O_{14,48}Ar_{0,3204}C_{0,0145}$ ; энтальпия – 1,0460 кДж/кг). Исследовалось влияние давления на состав продуктов сгорания в адиабатическом реакторе при избытке горючего.

<sup>1</sup> Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А., и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т. М.: Наука, 1982.

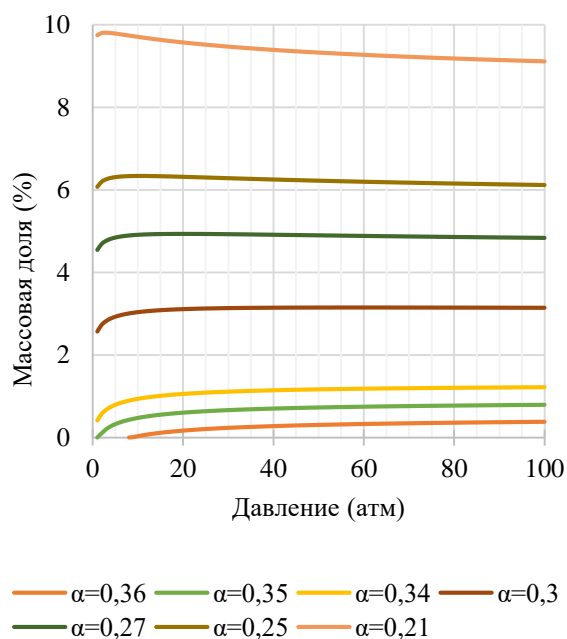


Рис.1 – Содержание сажи в продуктах сгорания при  $\alpha > 0,2$

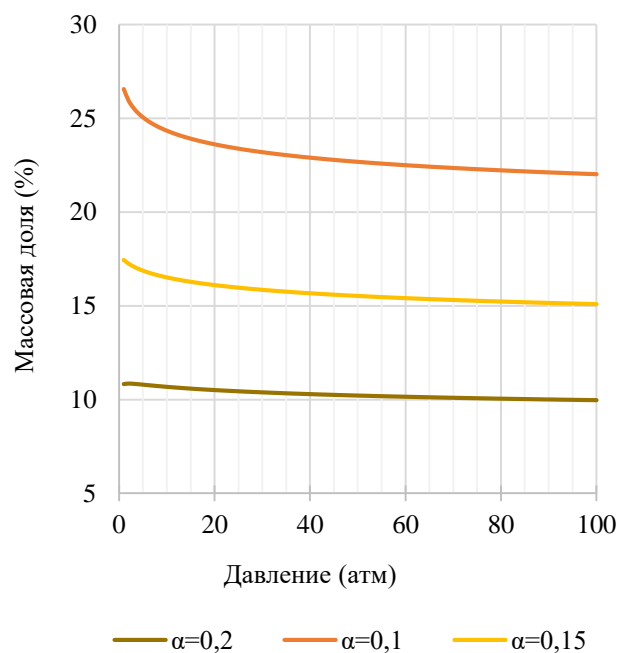


Рис.2 – Содержание сажи в продуктах сгорания при  $\alpha \leq 0,2$

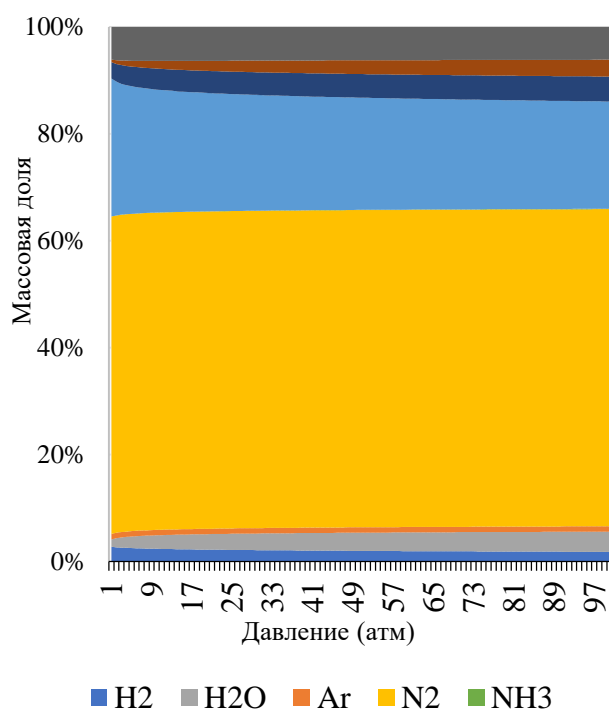


Рис.3 – Зависимость состава продуктов сгорания от давления при  $\alpha = 0,25$

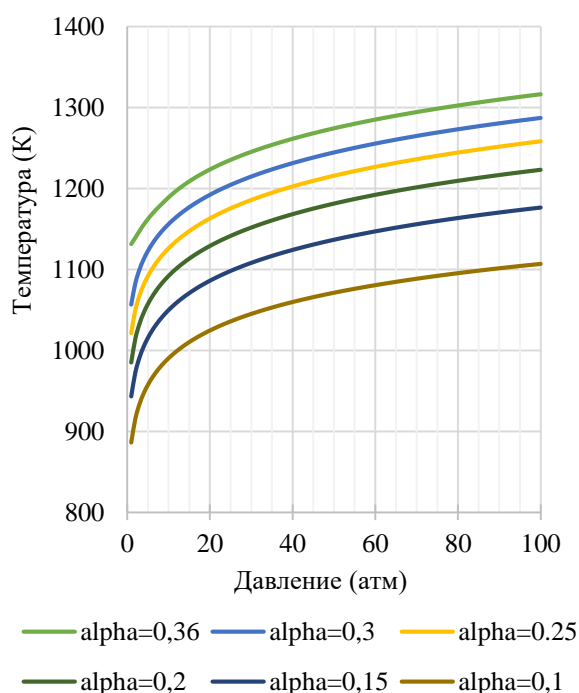


Рис.4 – Изменение температуры сгорания в зависимости от давления

Из полученных результатов в частности следует, что:

- конденсированная фаза (сажа) входит в состав продуктов сгорания при коэффициенте избытка воздуха  $\alpha < 0.36$ ;
- при  $0.3 < \alpha < 0.36$  концентрация сажи с ростом давления монотонно возрастает (рис. 1), а при  $0.1 < \alpha < 0.25$  монотонно убывает (рис. 2). Это связано с ростом



температуры продуктов сгорания с увеличением  $\alpha$  при фиксированном давлении (рис. 1-4).

Во **второй** главе рассмотрены особенности, имеющие место при моделировании равновесного термодинамического состояния химически реагирующих систем с учетом свойств реального газа, моделируемых с использованием вириального уравнения состояния с ограниченным числом коэффициентов. Современное вириальное уравнение состояния представляется в виде степенного ряда по плотности:

$$\frac{pv}{R_0T\gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{C\gamma^2}{v^2} + \frac{D\gamma^3}{v^3} + \dots \text{ или } pv = zR_0T\gamma \quad (8)$$

Коэффициенты  $B(T)$ ,  $C(T)$ ,  $D(T)$ , и т.д., зависящие от температуры, называются вторым, третьим, четвертым и т.д. вириальным коэффициентом, они имеют четкий физический смысл. Первый вириальный коэффициент равен единице и соответствует поведению идеального газа, второй описывает взаимодействие между двумя молекулами, третий — тремя, и т.д.

При относительно невысоких давлениях и температурах вероятность одновременного взаимодействия для более чем трех молекул мала, поэтому свойства газа достаточно точно описываются с помощью двух вириальных коэффициентов. При этом второй вириальный коэффициент  $B(T)$  может быть вычислен с использованием потенциала межмолекулярного взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$B(T) = -\frac{2\pi N_A}{3k_B T} \int_0^\infty r^3 \frac{dU}{dr} \exp\left\{-\frac{U(r)}{RT}\right\} dr, \quad (9)$$

где  $N_A$  — число Авогадро,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $r$  — расстояние между молекулами;  $U(r)$  — потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия.

Модельный потенциал Леннарда-Джонса записывается в виде:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (10)$$

где  $\sigma$  — расстояние между частицами, при котором энергия их взаимодействия равна 0;  $\varepsilon$  — минимальное значение энергии взаимодействия.

Необходимо обратить внимание на то, что вириальное уравнение было написано для чистого газа. Стоит важный вопрос о переходе от уравнения состояния чистого газа к уравнению состояния газовой смеси, поскольку выбранный способ перехода оказывает большое влияние на время вычислений и точность получаемых результатов. В настоящей работе используется однофлюидное приближение, при котором параметры для эквивалентного вещества могут быть вычислены по формуле Ван-дер-Ваальса:

$$\sigma_{см}^3 = \sum_i \sum_j x_i x_j \sigma_{ij}^3; \quad (11)$$

$$\varepsilon_{см} \sigma_{см}^3 = \sum_i \sum_j x_i x_j \sigma_{ij}^3 \varepsilon_{ij}; \quad (12)$$

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

Для реализации алгоритма по построению равновесной адиабаты и расчета характеристик продуктов детонации горючей смеси применялся упрощенный вариант вириального уравнения:

$$\frac{pv}{R_0 T \gamma} = 1 + \frac{B\gamma}{v} + \frac{0,625b_0^2 \gamma^2}{v^2}; \quad (13)$$

$$B = \sum_i \sum_j B_{ij} x_i x_j = \sum_i \sum_j x_i x_j b_{0ij} B_{ij}^*(T^*); \quad B_{ij} = b_{ij} B_{ij}^*(T^*); \quad b_{ij} = 2\pi N_A \sigma_{ij}^3; \quad (14)$$

$$C = 0,625(2\pi N_A \sigma_{cm}^3)^2 = 0,360 \cdot 10^{-12} (\sigma_{cm}^3)^2, \quad [\sigma_{cm}] = \text{Å}; \quad (15)$$

где  $B^*(T^*)$  - справочное значение второго коэффициента при нулевом давлении для потенциала Леннарда – Джонса в зависимости от безразмерной температуры  $T^* = kT / \varepsilon$

Значение каждой термодинамической характеристики можно представить в виде суммы слагаемого, отвечающего модель совершенного газа, и слагаемого, учитывающего реальные свойства термодинамической системы. Применив уравнение состояния (13), получим формулы для поправок для термодинамических функций:

$$\Delta U = \int_v^\infty \left( p - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} \right) dv = - \frac{RT^2 \gamma^2}{v} \left( \frac{\partial B}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}}; \quad (16)$$

$$\Delta S = \int_v^\infty \left[ \frac{R\gamma T}{v} - \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} \right] dv = - \left[ \frac{R\gamma^2 (B + T (\partial B / \partial T)_{v, \bar{\gamma}})}{v} + \frac{RC\gamma^3}{2v^2} \right]; \quad (17)$$

$$\Delta H = \Delta U + pv - R_0 T \gamma; \quad (18)$$

$$\frac{\Delta \mu_i}{RT} = \frac{1}{RT} \int_v^\infty \left( \frac{RT}{v} - \left( \frac{\partial p}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{i \neq i}} \right) dv \quad (19)$$

$$= - \left( \left( 2B\gamma + \gamma^2 \left( \frac{\partial B}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{i \neq i}} \right) \frac{1}{v} + \left( 3C\gamma^2 + \gamma^3 \left( \frac{\partial C}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{i \neq i}} \right) \frac{1}{2v^2} \right).$$

$$\left( \frac{\partial B}{\partial T} \right)_{v, \bar{\gamma}} = \sum_i \sum_j x_i x_j b_{0ij} \frac{dB_{ij}^*}{dT}; \quad (20)$$

$$\left( \frac{\partial B}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{i \neq i}} = \frac{2\gamma_i \gamma - 2\gamma_i^2}{\gamma^3} b_{0i} B_i^*(T_i^*) + \sum_{j \neq i} \frac{2(\gamma - 2\gamma_i)}{\gamma^3} \gamma_j b_{0ij} B_{ij}^*(T_{ij}^*); \quad (21)$$

$$\left( \frac{\partial C}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{i \neq i}} = 0,72 \cdot 10^{-12} \sigma_{cm}^3 \left( \frac{2\gamma_i \gamma - 2\gamma_i^2}{\gamma^3} \sigma_i^3 + \sum_{j \neq i} 2 \frac{\gamma - 2\gamma_i}{\gamma^3} \gamma_j \sigma_{ij}^3 \right). \quad (22)$$

Разработанные вычислительные алгоритмы дают возможность рассчитать равновесный состав и термодинамические свойства системы с применением вириального уравнения состояния реального газа (13), если известно содержание в ней химических элементов и заданы два параметра из списка:  $p, T, V, S, H, U$ . Были реализованы вычислительные алгоритмы, записанные в универсальной форме, позволяющей в дальнейшем добавлять другие уравнения состояния и решать более сложные задачи, некоторые из которых будут рассмотрены в главах 3, 4. Для проверки достоверности получаемых результатов было проведено сравнение результатов расчета термодинамических систем при повышенном давлении, рассмотренных различными авторами и опубликованными в литературных источниках.

В Таблица 1 представлено сравнение экспериментальных данных и полученных с помощью программы REAL с результатом расчета зависимости максимального давления от плотности заряжания  $\Delta$  для химической системы  $C_{16.840}H_{24.458}O_{38.265}N_{11.485}$  (энтальпия образования  $\Delta H_f^{298} = -2027,4 \text{ кДж / кг}$ ). Из таблицы видно, что совпадение экспериментальных данных из литературы и вычисленных значений являются удовлетворительными.

Таблица 1 – Максимальное давление в бомбе, МПа для химической системы  $C_{16.840}H_{24.458}O_{38.265}N_{11.485}$

Плотность $\Delta$ , г/см <sup>3</sup>	Данные <sup>2</sup>	Данные <sup>3</sup>	Расчет
0,0263	30,4	30,1	30,5
0,042	50	52,3	50
0,0585	70,7	74	71,3
0,0755	94,3	95,7	94,23
0,1066	138,7	139	136,8
0,1344	181,1	184,3	180,87
0,1546	213,6	212,3	213,2
0,1819	260	259,7	259,2
0,2049	301,2	301,1	300
0,2211	331,5	332,2	330

В Таблица 2 сравниваются значения коволюма  $\alpha = v - RTn_{газ} / p$ , силы пороха  $f = RTn_{газ}$  и температуры горения  $T$ , вычисленные в настоящей работе с результатами, приведенными в опубликованных литературных источниках для двух систем:

Система 1:  $C_{14.828}H_{32.426}O_{28.269}N_{23.842}Na_{0.043}Al_{0.014}F_{0.085}$   $\Delta H_f^{298} = -1583,4 \text{ кДж / кг}$   
 $\Delta = 0,2 \text{ см}^3 / \text{г}$ . Система 2:  $C_{22.811}H_{28.864}O_{35.163}N_{9.188}K_{0.102}S_{0.051}$   $\Delta H_f^{298} = -1583,4 \text{ кДж / кг}$   
 $\Delta = 0,2 \text{ см}^3 / \text{г}$ .

<sup>2</sup> Белов Г.В. Использование методов линейного программирования для расчета равновесного состава гетерогенных систем с растворами // Вычислительные методы и программирование, Т. 10, 2009. pp. 56-61.

<sup>3</sup> Crow A.D., Grimshaw W.E. On the Equation of State of Propellant Gases // Philosophical Transactions of the Royal Society of London, T. 682A, No. 230, 1931. pp. 39-73.

Таблица 2 – Сравнение вычисленных характеристик с опубликованными данными

Параметры		Система 1	Система 2
$T, K$	Расчет	2993	2853
	Данные <sup>4</sup>	2988	2859
	Данные <sup>5</sup>	3040	2838
$f, кДж$	Расчет	1070	992,9
	Данные <sup>4</sup>	1069	994,9
	Данные <sup>5</sup>	1088	989,3
$\alpha, см^3/кг$	Расчет	1,067	1,053
	Данные <sup>4</sup>	1,129	1,078
	Данные <sup>5</sup>	1,057	1,044

В третьей главе приводятся физико-математические модели, вычислительные алгоритмы и результаты численного моделирования течения продуктов сгорания при изоэнтропическом расширении с учетом образования ионизированных компонентов. Проанализированы особенности в реализации алгоритма численного моделирования с использованием вириального уравнения состояния реального газа. Численно построены равновесные ударные адиабаты для метано-воздушной горючей смеси в широком диапазоне начальных параметров с учетом свойств реального газа.

В качестве примера изоэнтропического расширения продуктов сгорания рассмотрено равновесное квазиодномерное течение в канале переменного сечения с переходом через скорость звука. Математическая модель данного течения включает законы сохранения массы, импульса, энергии и элементного состава, а также условия химического равновесия и электронейтральности.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{d}{dx}(\rho u F) = 0; \quad \frac{d}{dx}(\rho u^2 + p) F = p \frac{dF}{dx}; \quad \frac{d}{dx} \rho u \left( h + \frac{u^2}{2} \right) F = 0; \\
 R \ln \frac{RT \gamma_i}{p_0 v} + \frac{G_i^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i - \lambda_e A_e^i = 0, \quad i = 1, \dots, N \\
 \left( \frac{G_l^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l \right) \gamma_l = 0, \quad l = N + 1, \dots, N + L \\
 \sum_{i=1}^{N+L} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, \quad K = 1, \dots, N_e, \quad \gamma_i > 0, \quad i = 1, \dots, N, \quad \gamma_i \geq 0, \quad i = N, \dots, N + L \\
 \sum_{i=1}^N A_e^i \gamma_i = 0
 \end{array} \right. \quad (23)$$

<sup>4</sup> Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. М.: Научный мир, 2002. 64-71 с.

<sup>5</sup> Fedoroff B.T., Sheffield O.E. Encyclopedia of Explosives and Related Items. Dover: Picatinny Arsenal, 1962.

Где  $\rho, u, p, T, h, \gamma_i$  - плотность, скорость, давление, температура, энтальпия и мольно-массовые концентраций смеси продуктов сгорания соответственно;  $F=F(x)$  – зависимость площади сопла от продольной координаты.

Была рассмотрена стехиометрическая смесь водорода (энтальпия  $H_{H_2} = -4354 \text{ кДж / кг}$ ) и кислорода (энтальпия  $H_{O_2} = -398 \text{ кДж / кг}$ ) с добавкой щелочных металлов  $Na, Cs$ . Продукты сгорания представляли собой смесь совершенных газов без энергетического взаимодействия и обмена массой с окружающей средой. В состав продуктов сгорания топлива кислорода-водорода с добавлением  $Na$  (или  $Cs$ ) может входить около  $N \approx 50$  возможных соединений химических элементов  $H, O, N, Na (Cs)$ , основными из которых являются  $O_2, HO_2, H_2O_2, O^+, O_2^+, H, O, H_2, OH, H_2O, H^+, H_2^+, OH^+, H_2O^+, Na^+ (Cs^+), e, O^-, O_2^-, H^-, OH^-, H_2O^-$ .

Были проведены вычислительные эксперименты с добавками натрия в количестве  $(0,25 \div 2)\%$  по массовому расходу. Результаты математического моделирования представлены на Рис. 5-6.

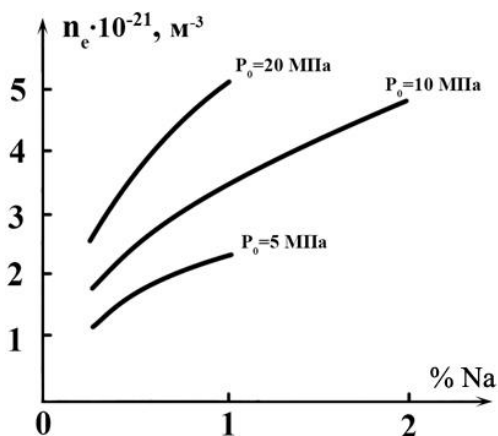


Рис. 5 – Зависимость концентрации электронов на входе в канал от добавки  $Na$

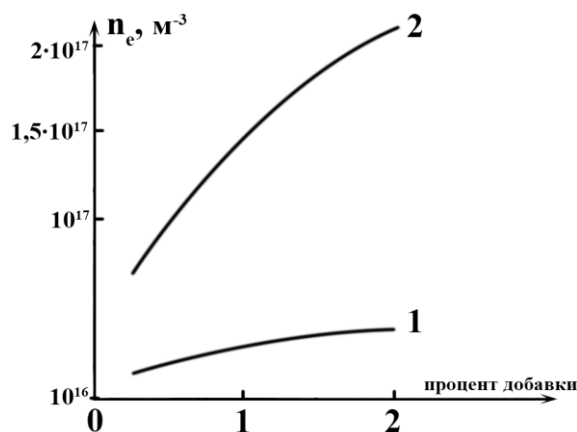


Рис. 6 – Зависимость  $n_e$  на выходе из канала от процента добавки щелочного металла ( $p_0=10 \text{ МПа}$ ). 1 – добавка  $Na$ ; 2 – добавка  $Cs$

Из результатов моделирования течений потока продуктов сгорания в канале можно сделать следующие выводы:

- Если на входе в канал концентрации отрицательных ионов превышают концентрацию электронов, то после прохождения минимального сечения и далее по тракту она становится меньше электронной концентрации. На выходе из канала  $n_e$  превышает  $n_i^-$  более, чем на порядок;

- По мере движения вдоль тракта равновесная концентрация заряженных частиц вследствие рекомбинации снижается на 6-7 порядков. Поскольку в вычислительный алгоритм заложено условие термодинамического равновесия, то уменьшение концентраций заряженных частиц, в основном, есть следствие уменьшения температуры плазменного потока;

- С ростом начального давления  $p_0$  температура на входе в канал растет, а на выходе из канала зависимость обратная – температура падает. Поэтому и концентрация заряженных частиц в выходном сечении падает с ростом  $p_0$ .

В представленных вычислительных экспериментах в качестве легко ионизируемой добавки использовался  $Na$ , у которого потенциал ионизации равен  $I = 5,14B$ . Если взять в качестве добавки цезий  $Cs$ , у которого  $I = 3,89B$ , то концентрация заряженных частиц на выходе из сопла возрастает (Рис. 6).

Если при 1% добавки  $Na$  и давлении на входе в канал  $10^7$  Па, а на выходе -  $10^4$  Па концентрация электронов составляет на выходе -  $n_e = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ , то с учетом указанных возможностей эту концентрацию можно увеличить на порядок и более. Соответственно степень ионизации плазмы в выходном сечении может достигать значения  $\lambda \sim 10^{-5}$  и более.

Система уравнений для определения равновесного состояния за волной детонации для реального газа в общем случае имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \ln \gamma_i = \ln \left( \frac{p_0 v}{RT} \right) + \frac{TS_i^0 - H_i^0}{RT} + \frac{\sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \lambda_j}{R} + \frac{\lambda_e A_e^i}{R} + \frac{1}{RT} \int_v^\infty \left( \left( \frac{\partial p}{\partial \gamma_i} \right)_{T, v, \gamma_{l \neq i}} - \frac{RT}{v} \right) dv, i = 1 \dots N \\ \left( \frac{H_l(T) - TS_l}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l \right) \gamma_l = 0, l = N + 1, \dots, N + L \\ S_{cm} - \sum_i \gamma_i \left( S_i^0 - R \ln \frac{R_0 T \gamma_i}{p_0 v} \right) - \int_v^\infty \left( \frac{R \sum \gamma_i}{v} - \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \vec{\gamma}} \right) dv = 0 \\ U_{cm} - \sum n_i U_i^0 - \int_v^\infty \left( p - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \vec{\gamma}} \right) dv = 0 \\ H_{cm} - \sum \gamma_i H_i - \int_v^\infty \left( p - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{v, \vec{\gamma}} \right) dv = 0 \\ \sum_{i=1}^{N_e} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N \\ \frac{pv}{RT\gamma} = z(v, T, \vec{\gamma}) \\ \sum_{i=1}^N A_e^i \gamma_i = 0 \\ U - U_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0) = 0, \text{ или } H - H_0 - \frac{1}{2}(p - p_0)(v + v_0) = 0 \\ \Pi = C \end{array} \right. \quad (24)$$

Индекс «0» обозначает параметры потока перед скачком, параметры без индекса соответствуют течению за скачком.

Последним в системе (24)  $\Pi = C$  может служить любое дополнительное уравнение в зависимости от того, на какой фазовой координате построена равновесная адиабатная характеристика.

На Рис. 7 представлено сравнение полученных расчетных значений скорости детонации с экспериментальными данными в работе<sup>6</sup> при использовании уравнения состояния совершенного и реального газа. Описание детонации смеси метан-кислород вириальным уравнением реального газа в этом случае дает значение скорости детонации, отличающее от экспериментальных данных меньше на 1%.

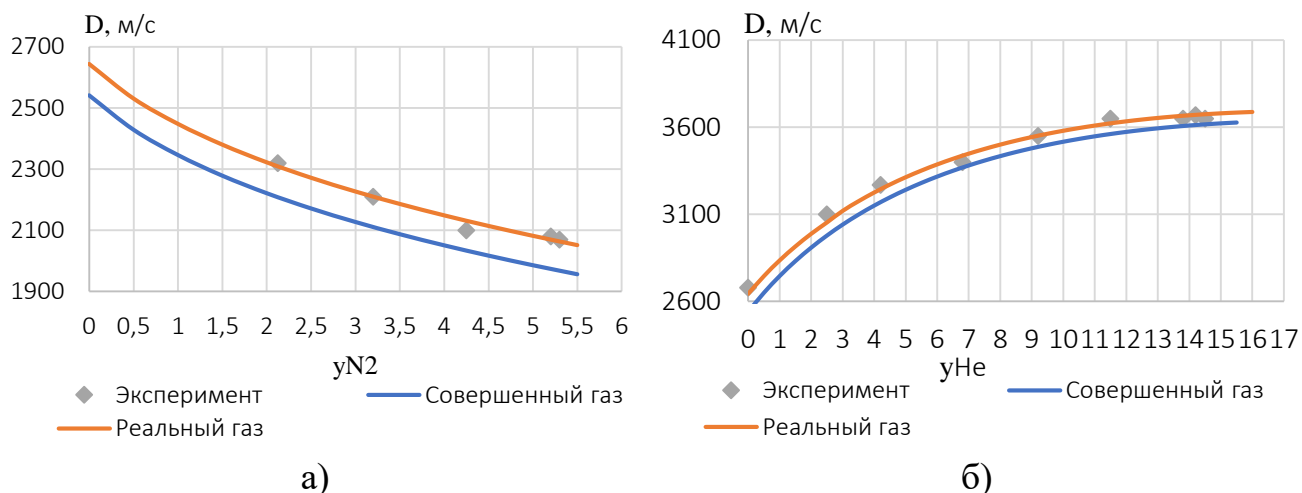


Рис. 7 – Экспериментальные и расчетные скорости детонации смеси

а)  $CH_4 + 2O_2 + yN_2$  при  $T_0 = 298K$ ,  $p_0 = 3,5MPa$

б)  $CH_4 + 2O_2 + yHe$  при  $T_0 = 298K$ ,  $p_0 = 3,5MPa$

Было проведено исследование характеристик равновесной адиабаты для продуктов детонации стехиометрической смеси метана ( $CH_4$ ) и воздуха (массовый состав  $23,15\% O_2 + 75,5\% N_2 + 1,292\% Ar + 0,058\% CO_2$ ) в широком диапазоне начального давления  $p_0 = 1 \div 50 \text{ атм}$ , начальной температуры  $T_0 = 298,15 \div 1000 K$  и коэффициента окислителя  $\alpha = 0,4 \div 5$  с использованием различных моделей газа. В состав продуктов детонации метана в воздухе может входить около 150 возможных соединений химических элементов  $C, H, O, N, Ar$  [2]. При стандартных условиях  $p_0 = 1 \text{ атм}$ ,  $T_0 = 298,15 K$  скорость и температура детонации имеют максимальное значение  $D = 1806 \text{ м/с}$ ,  $T = 2758 K$  в районе стехиометрического коэффициента избытка окислителя  $\alpha \approx 0,9$ . Не смотря на большое количество химических веществ, входящих в расчетную модель, состав продуктов детонации при умеренных начальных условиях состоит из  $N_2, H_2O, CO_2, CO, H_2, Ar, OH$ .

Равновесная адиабата состоит из детонационной и дефлаграционной ветвей, на каждой из которых в точке экстремума одновременно достигается экстремальное значение и скорости фронта, и энтропии (Рис. 8).

На Рис.9 представлен анализ влияния начальной температуры на характеристики равновесной адиабаты. Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что начальная температура оказывает незначительное влияние на температуру и скорость детонации ЧЖ. При  $T_0 = 298,15 K$  скорость детонации ЧЖ

<sup>6</sup> Legendre J.F., Giraud M., Bauer P. Detonation properties of dense methane-oxygen-diluent gaseous mixtures: application to ram accelerators // Shock Wave, No. 8, 1998. pp. 267-273.

и температура соответственно равны 1783,6 м/с и 2737,5 К. При  $T_0 = 1000\text{K}$  - 1700,85 м/с; 2828,5К. Наблюдается малый прирост детонационной температуры при увеличении  $T_0$  [6].

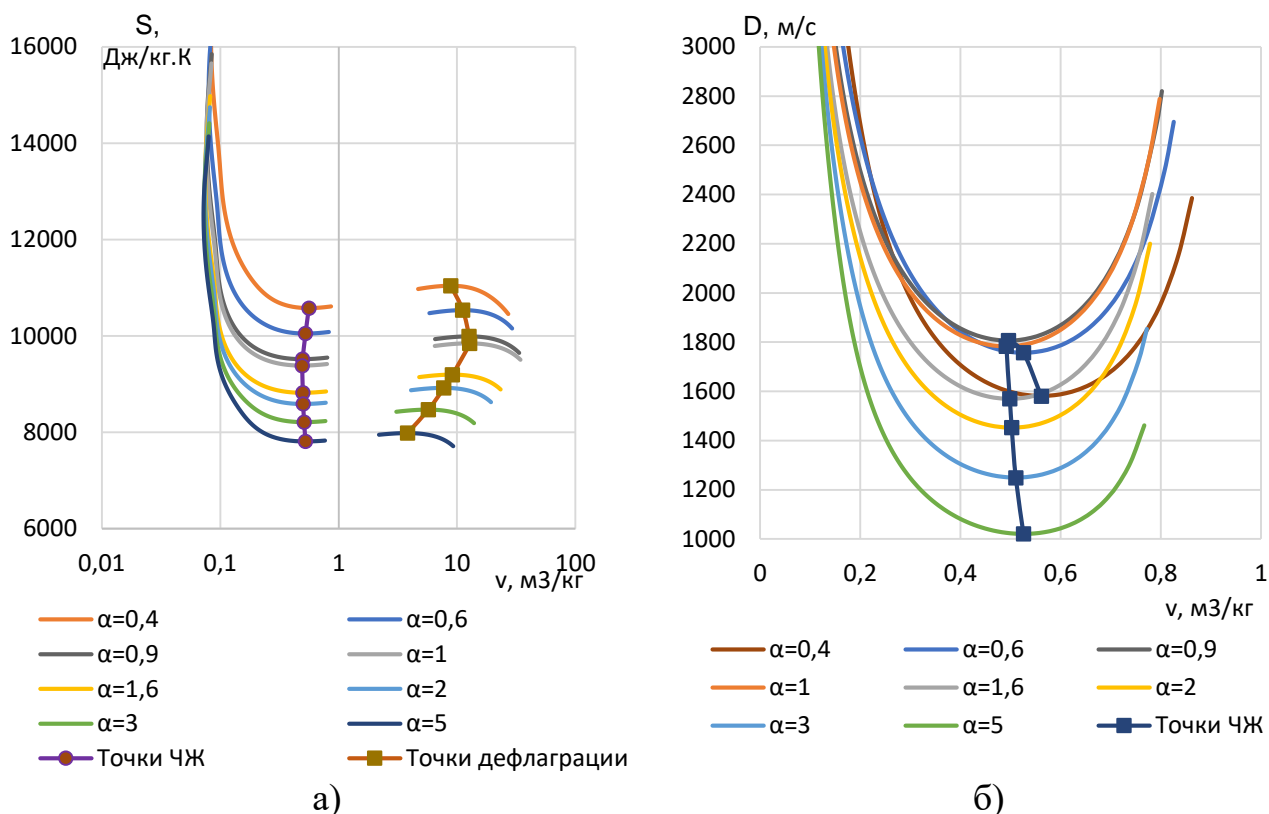


Рис. 8 – Равновесная адиабата смеси  $CH_4$ +воздух при изменении коэффициента избытка окислителя  $p_0=1\text{атм}$ ,  $T_0=298,15\text{К}$ . а)  $S-v$ ; б) Детонационная часть  $D-v$

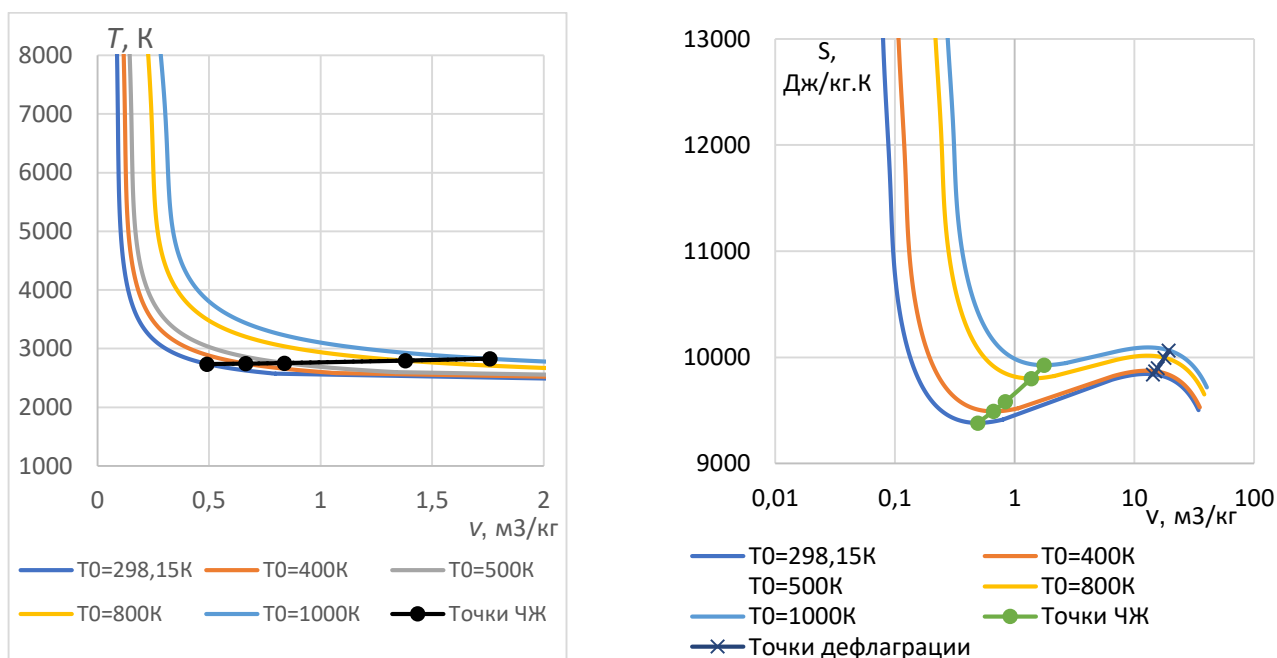


Рис.9 – Равновесная адиабата стехиометрической смеси  $CH_4$ +воздух при изменении начальной температуры,  $p_0=1\text{атм}$ . а)  $T-v$ ; б)  $S-v$

При изменении начального давление  $p_0$  от 1 атм до 50 атм наблюдается смещение точки ЧЖ в сторону большего давления с учетом свойств реального газа.



При начальном давлении 50 атм давление в волне ЧЖ может достигнуть 96,7МПа для модели реального газа и 90,8МПа – совершенного газа [7]. При этом по сравнению с совершенным газом при росте начального давления скорость детонации и скорость звука в точке ЧЖ повышаются, при  $p_0 = 50\text{атм}$  отличие достигает 13%. При невысоком начальном давлении характеристики газа для совершенного и реального газа практически совпадают. С ростом  $p_0$  диаграммы  $p(v)$  и  $S(v)$  для реального газа перемещается вправо в сторону увеличения удельного объема  $v$ . Для  $p_0=10\text{атм}$  при давлении газа за скачком  $p \approx 40\text{МПа}$  наблюдается отличие удельного объема  $\Delta v \approx 4\%$ ,  $\Delta a \approx 5\%$  и может увеличиться до 10% для удельного объема и 11% для скорости звука при  $p \approx 200\text{МПа}$  (Рис. 10). Это отличие может объясниться сжимаемостью газа в модели реального газа. При этом значение температуры  $T$ , скорости распространения фронта детонации  $D$  практически не меняются для каждого зафиксированного значения давления  $p$ .

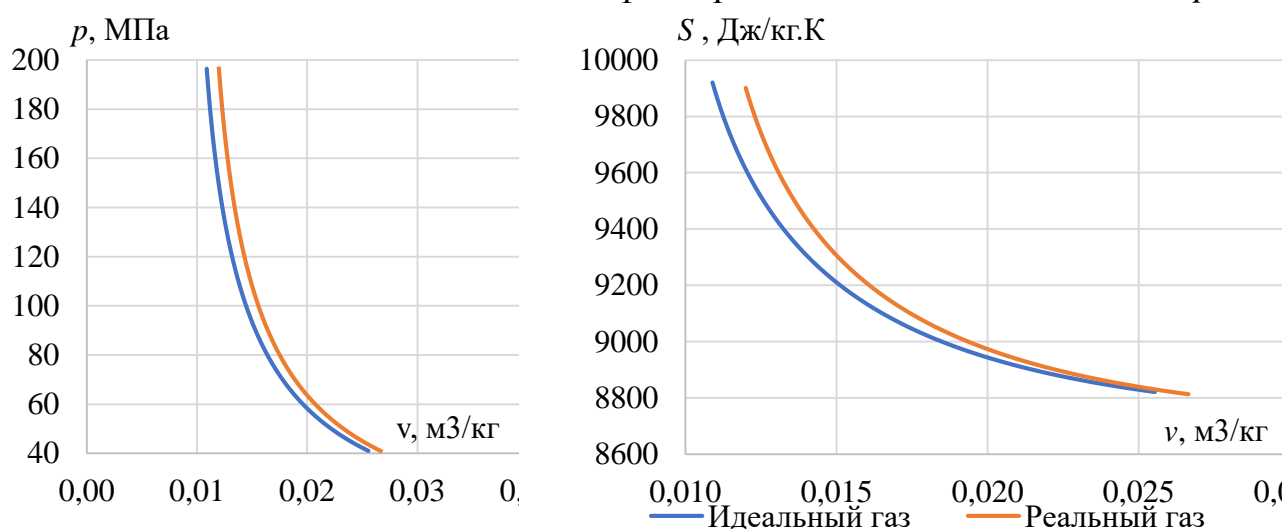


Рис. 10 – Равновесная адиабата метана в воздухе при  $p_0=10\text{атм}$

Стоит отметить, что в зоне повышенного начального давления  $p_0$  необходимо учитывать свойства реального газа при исследовании характеристик равновесной адиабаты в тех точках, где удельный объем задается относительно маленьким значением. Из-за высокой наклонности характерной диаграммы на фазовых плоскостях  $p-v$ ,  $S-v$ . в области повышенного начального давления результаты расчетов с использованием модели совершенного газа могут существенно отличаться от реального газа.

Приведем также результаты численного моделирования равновесной ударной адиабаты для однократно ионизированного воздуха [3]. Давление воздуха перед ударной волной варьировалось от 0,1МПа до 2МПа. Температура принималась равной 298,15К. Начальный массовой химический состав  $23,15\% O_2 + 75,5\% N_2 + 1,292\% Ar + 0,058\% CO_2$ . На Рис. 11 приведены равновесные ударные адиабаты для начальных давлений 0,1МПа; 0,5МПа; 1МПа; 2МПа. Видно, что в отличие от горючих смесей равновесная адиабата воздуха является непрерывной кривой, проходящей через точку, соответствующую состоянию перед ударной волной. Нефизический участок отсутствует.

На Рис. 12 представлены равновесная и замороженная ударные адиабаты воздуха при стандартных условиях перед ударной волной  $p_0 = 0,1 \text{ МПа}; T_0 = 298,15 \text{ К}$ . Адиабаты практически совпадают до точки  $v = 0,15 \text{ м}^3 / \text{кг}; p = 3,24 \text{ МПа}; D = 1834 \text{ м} / \text{с}$  (отличие параметров меньше 0,5%). При росте давления за ударной волной происходит процесс диссоциации и ионизации, что приводит к немонотонностям на графике равновесной адиабаты. Полученные результаты хорошо коррелируют с опубликованными данными.

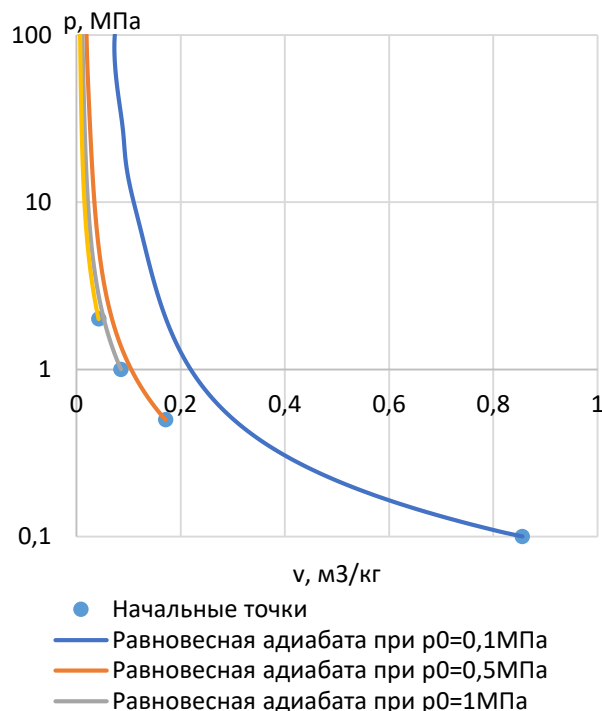


Рис. 11 – Равновесная адиабата воздуха при различных давлениях перед ударной волной,  $T_0 = 298,15 \text{ К}$ .

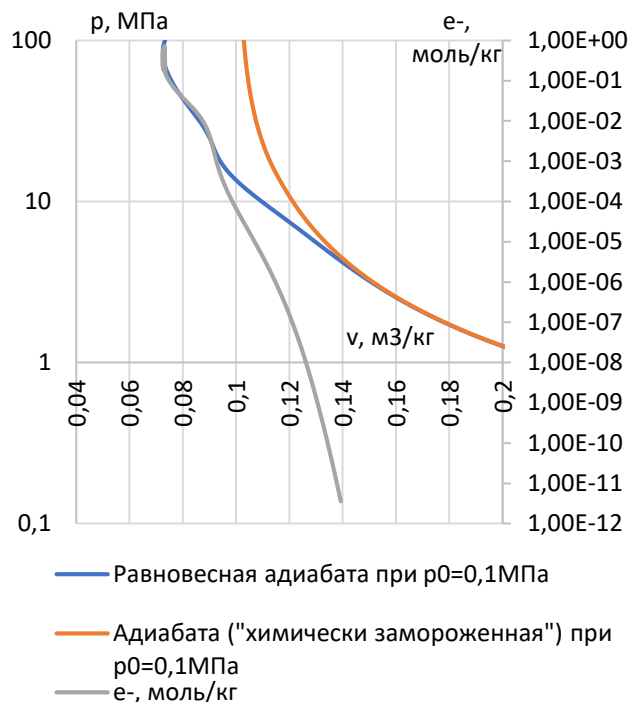


Рис. 12 – Равновесная и «химически замороженная» адиабаты воздуха при стандартных условиях перед ударной волной.

В четвертой главе приведены вычислительные алгоритмы решения задачи о распаде произвольного разрыва на границе между инертным и детонирующим газами. Для описания свойств детонирующего газа использовались уравнения состояния совершенного и реального газов [4, 10], а также условия термодинамического равновесия или предположение о неизменности состава.

Рассматривается бесконечный канал постоянного сечения, разделенный мембраной. Слева от мембраны находится инертный газ, справа – горючая смесь. Возникающее течение является автомодельным. По инертному газу может распространяться либо ударная волна, либо веер волн разрежения, а по детонирующему газу — либо детонационная волна в режиме Чепмена-Жуге с присоединённой к ней волной разрежения (ВР), либо пересжатая волна детонации как разрыв, разделяющий области течения с постоянными значениями газодинамических параметров. Между двумя волнами образуется контактный разрыв (КР), отделяющий инертный газ от продуктов сгорания.

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

$$\begin{aligned} \rho(D - u_D) &= \rho(D - u_3) \\ p_D + \rho(D - u_D)^2 &= p_3 + \rho_3(D - u_3)^2 \\ \rho_D(D - u_D) \left( U_D + \frac{p_D}{\rho_D} + \frac{(D - u_D)^2}{2} \right) &= \rho_3(D - u_3) \left( U_3 + \frac{p_3}{\rho_3} + \frac{(D - u_3)^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (25)$$

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

Система уравнений одномерных нестационарных течений с плоскими волнами, зависящая лишь от переменной  $\xi = x/t$ , имеет два решения. Первое описывает однородное состояние газа  $u = const, \rho = const, p = const$ . Второе представляет собой решение для центрированных волн Римана:

$$\begin{cases} \xi = \frac{dx}{dt} = u \pm a, du \pm \frac{1}{\rho a} dp = 0 \\ S = const \end{cases} \quad (26)$$

Решение задачи о распаде произвольного разрыва сводится к решению нелинейного уравнения относительно давления на контактном разрыве. Если вводим функции  $f(p, p_m)$ :

$$f(p, p_m) = \begin{cases} \int_{p_m}^p \frac{dp}{\rho a}, & p < p_m - \text{ для ВР} \\ \sqrt{\left( \frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho} \right) (p - p_m)}, & p > p_m - \text{ для УР} \end{cases} \quad (27)$$

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

$$F(p) = u_2 - u_1 + f(p, p_1) + f(p, p_2) = 0. \quad (28)$$

Решение рассматриваемой задачи можно разбить на несколько этапов. На первом этапе находятся параметры детонации Чепмена-Жуге, распространяющейся по исходной горючей смеси. Для этого решаются соотношения (25), дополненные уравнениями состояния и для газа за-водной – условиями термодинамического равновесия, а также условием Чепмена-Жуге:  $D - u = a$  ( $a$  – равновесная скорость звука). На втором этапе решается вспомогательная задача о распаде разрыва с параметрами, равными  $u_1, p_1, \rho_1$  при  $x < 0$ , и, найденными на первом этапе, параметрами детонации Чепмена-Жуге  $u_{чж}, p_{чж}, \rho_{чж}$  при  $x > 0$ .

Была решена задача о распаде разрыва на границе гелий – стехиометрическая водородно-кислородная горючая смесь. Левое пространство заполнено  $He$  с температурой  $T_0 = 300K$ , давлением  $p_1 = 2...100MPa$ . Правая система состоит из стехиометрической газовой смеси  $H_2-O_2$  с температурой  $T_1 = 300K$  и давлением  $p_0$ , варьируемым от 0,1МПа до 2МПа.

Проведено численное исследование влияние давления инертного газа на изменение конфигураций разрыва. Во всем рассмотренном диапазоне давлений инертного газа влево образуется только ВВР. Ширина веера в инертном газе уменьшается по мере уменьшения его давления. При высоких давлениях  $p_1$  вправо возникает пересжатая ДВ в продуктах сгорания  $H_2+O_2$ . Значение давления этой волны стремится к давлению ЧЖ при убывании давления инертного газа. При давлении  $p_1 \approx 39,6MPa$  наблюдается образование ВР в продуктах сгорания, примыкающего к волне ЧЖ. Уменьшение давления инертного газа сопровождается расширением примыкающей волны разрежения.

Была решена задача о распаде разрыва для детонирующего газа в покое газе. Левое полупространство заполнено аргоном с температурой  $T_1=300K$  и давлением  $p_1$  до 100МПа, правое – стехиометрической метано-воздушной смесью, температура -  $T_0 = 300K$ , давление варьируется от  $p_0$  до 5МПа.

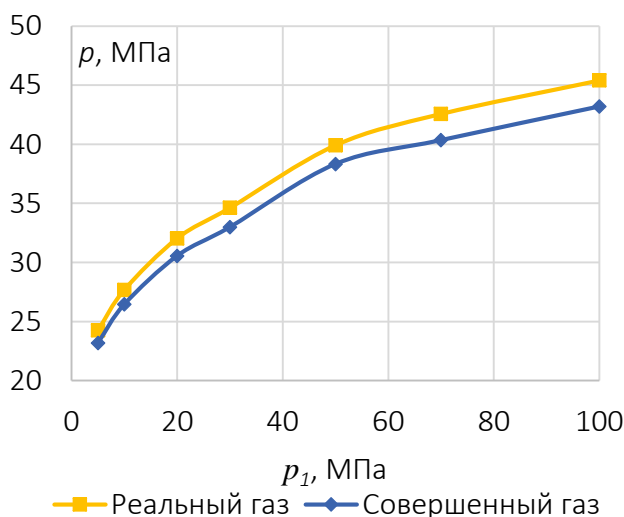


Рис. 13 – Изменение давления на контактном разрыве в зависимости от давления инертного газа при начальном давлении горючей смеси  $p_0 = 5MPa$ .

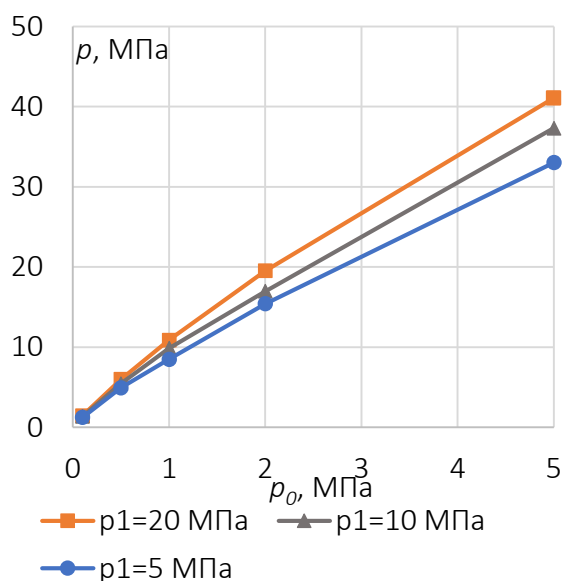


Рис.14 – Зависимости давления на контактном разрыве от изменения начального давления горючего при различных давлениях  $p_1$ .

Результаты моделирования показали, что при начальном давлении горючей смеси  $p_1 = 5MPa$  давление на контактном разрыве для модели реального газа превышает на 4-5% (рис. 13, 14), при этом давление в точке ЧЖ отличается приростом на 6,4% -  $p_{II} = 95,33MPa$  для реального газа, 89,61МПа для совершенного. На значение температуры и скорости на КР вид модели газа оказывает малое влияние. Наблюдается монотонный рост давления на контактном

разрыве при увеличении давления, как и в инертном газе, так и в горючей смеси. Возрастание  $p_0$  приводит к большому приросту давления на разрыве. Так при фиксированном  $p_1 = 10 \text{ МПа}$  при увеличении начального давления горючего газа от 2 МПа до 5 МПа прирост давления на КР составляет  $\Delta p = 14,7 \text{ МПа}$ .

Из анализа химического состава продуктов сгорания справа от КР следует, что при модели реального газа снижение давление на КР оказывает существенное влияние на равновесные концентрации продуктов рекомбинации таких, как  $H_2O$ ,  $CO_2$  возрастают, при этом снижаются концентрации  $CO$  (рис. 4.17, 4.18),  $O$ ,  $OH$ . При расчетных давлениях  $p_0 = 5 \text{ МПа}$ ,  $p_1 = 100 \text{ МПа}$  мольная доля  $CO$  снижается на 14,01%,  $O$  – 13,18%,  $OH$  – 9,33%.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

### **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ**

1. Разработаны и апробированы физико-математическая и вычислительная модели для расчета равновесного состава многокомпонентной многофазной смеси, для случая, когда газовая фаза описывается термическим уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения при заданных парах термодинамических величин, а также равновесных ударных адиабат и изоэнтропических течений.

2. Даны количественные оценки влияния вида уравнения состояния, описывающего исходную газовую смесь и продукты сгорания на достигаемые термодинамически равновесные параметры при расчете детонационных адиабат, параметров детонации Чепмена-Жуге для смесей водород- кислород, метан-кислород-азот-инертный газ и равновесных изоэнтропических течений.

3. Разработан и апробирован вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва для случая, когда слева и справа от начального разрыва и результирующего контактного разрыва газовая смесь может быть, как замороженная, так и равновесная и описываться как уравнением состояния совершенного газа, так и уравнением состояния с вириальными коэффициентами и однофлюидной моделью смешения.

4. Количественные характеристики, описывающие влияние уравнения состояния продуктов сгорания на реализующиеся при решении задачи о распаде произвольного разрыва параметры течения, для газовых пар: гелий – смесь водорода с кислородом, аргон – смесь метана с воздухом, для случая равновесного состояния продуктов сгорания.

Разработанные физико-математическая и вычислительные модели позволяют проводить экспресс-анализ химически равновесных многофазных течений, газовая фаза в которых описывается уравнениями состояния совершенного и реального газа.

## **СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

### **Список опубликованных работ в журналах списка ВАК и из МСЦ**

1. Гидаспов В. Ю., Зыонг Минь Дык. Вычислительный алгоритм расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированной фазы. Труды МАИ, 2020, №112.
2. Зыонг Минь Дык. Особенности численного моделирования равновесной ударной адиабаты при использовании уравнения состояния реального газа. Труды МАИ, 2021, № 120.
3. Гидаспов В. Ю., Северина Н. С., Зыонг Минь Дык. Численное исследование влияния неидеальности газа на фокусировку ударной волны в канале с полусферическим торцом. Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59. № 5. С. 730-736.
4. Гидаспов В. Ю., Зыонг Минь Дык. Влияние свойств реального газа на распад произвольного разрыва в детонирующем газе. Труды МАИ, 2022, №123.

### **Список опубликованных работ в других изданиях**

5. Гидаспов В. Ю., Зыонг Минь Дык. Вычислительный алгоритм расчета равновесного состава продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированной фазы в сборнике Материалы XXI Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019), 24–31 мая 2019 г., Алушта. — М.: Изд-во МАИ, 2019, с. 435-437;
6. Зыонг Минь Дык. Влияние начального состава и температуры на характеристики детонационных процессов в смеси метан-воздух в сборнике 19-я Международная конференция «Авиация и космонавтика». 23-27 ноября 2020 года. Москва. Тезисы. – М.: Издательство «Перо», 2020, с. 459-460;
7. Гидаспов В. Ю., Зыонг Минь Дык. Расчет детонационных адиабат метано-воздушной горючей смеси в широком диапазоне начальных данных в сборнике Материалы XIII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (АММАИ'2020), 6–13 сентября 2020 г., Алушта. — М.: Изд-во МАИ, 2020, с. 73-75;
8. Кассин Д. В., Зыонг Минь Дык. Математическое моделирование электродинамики камеры сгорания ЖРД. В сборнике 19-ой Международной конференции «Авиация и космонавтика». 23-27 ноября 2020 года. Москва. Тезисы. – М.: Издательство «Перо», 2020, с. 162-163;
9. Гидаспов В. Ю., Зыонг Минь Дык. Влияние учета реальных свойств на параметры детонации метано-воздушной горючей смеси в сборнике Материалы XXII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021), 4–13 сентября 2021 г., Алушта. — М.: Изд-во МАИ, 2021, с. 337;
10. Гидаспов В. Ю., Северина Н. С., Зыонг Минь Дык. Численное исследование фокусировки детонационной волны в канале с полусферическим торцом в сборнике Материалы XXII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021), 4–13 сентября 2021 г., Алушта. — М.: Изд-во МАИ, 2021, с. 338.