

Andrzej Teodorczyk

Instytut Techniki Ciepłej
Politechniki Warszawskiej

OBLICZANIE PARAMETRÓW TERMODYNAMICZNYCH SPALIN ZA PRZEGONIONĄ FAŁĄ DETONACYJNĄ

W pracy przedstawiono szczegółowo model obliczeniowy parametrów termodynamicznych spalin za przegonioną falą detonacyjną. Model oparty jest na jednowymiarowym przepływie ustalonym, przy zaniedbaniu sił masowych, bez dostarczania ciepła z zewnątrz i bez strat. Model uwzględnia stan równowagi chemicznej i termodynamicznej spalin dla reakcji spalania wodoru lub dowolnego węglowodoru w tlenie. Opisano szczegółowo iteracyjną metodę rozwiązania modelu oraz program komputerowy DEFASST realizujący to rozwiązanie. Przedstawiono także przykład obliczeniowy dla przegonionej fali detonacyjnej w stechiometrycznej mieszaninie wodorowo-tlenowej o ciśnieniu początkowym 0,1 MPa i temperaturze 293 K.

OZNACZENIA

- c_p - ciepło właściwe przy stałym ciśnieniu
- D - prędkość detonacji
- h - entalpia właściwa
- Δh_f^0 - entalpia właściwa tworzenia
- p - ciśnienie
- q - ciepło na jednostkę masy
- q_p - ciepło przewodzone na jednostkę masy
- K - stała równowagi
- \dot{m} - strumień masy
- R - stała gazowa
- T - temperatura
- M - masa cząsteczkowa

- u - prędkość gazu względem stacjonarnej fali detonacyjnej
- x - współrzędna prostopadła do fali
- X - udział masowy
- y - udział molowy
- λ - przewodność cieplna
- μ - lepkość kinematyczna
- ρ - gęstość
- ε - molowy stosunek paliwa do powietrza
- ϕ - stosunek ekwiwalencji
- α - liczba atomów węgla we wzorze chemicznym paliwa
- β - liczba atomów wodoru we wzorze chemicznym paliwa
- γ - liczba atomów tlenu we wzorze chemicznym paliwa
- δ - liczba atomów azotu we wzorze chemicznym paliwa
- ν - liczba moli

WSTĘP

Obliczanie prędkości i parametrów termodynamicznych fali detonacyjnej Chapmana-Jougueta jest jednym z klasycznych zagadnień teorii spalania.

Pierwsze rozwiązanie tego zagadnienia podał Zeldowicz [1]. W następnych latach opublikowano wiele innych modyfikacji jego metody [2:7]. Obecnie istnieje szereg programów komputerowych pozwalających na przeprowadzenie tych obliczeń bez wnikania w szczegóły metody rozwiązania. Najbardziej znane z nich to TRAN76 (znany także jako CEC72) [8] i STANJAN [9].

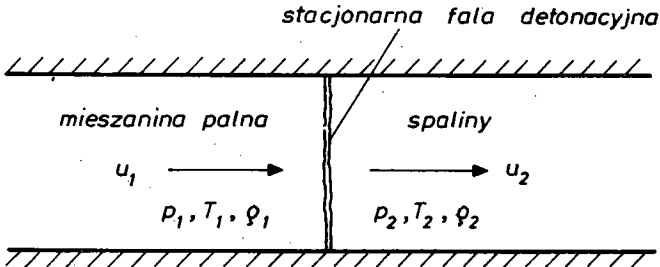
W określonych warunkach geometrycznych fala detonacyjna może rozprzestrzeniać się z prędkością większą od ustalonej wartości Chapmana-Jougueta. Zmianie ulegają wtedy również inne parametry termodynamiczne czynnika za falą. Fala taka nosi nazwę przegonionej fali detonacyjnej. Obliczaniu parametrów przegonionych fal detonacyjnych nie poświęcono w literaturze zbyt wielu prac, przypuszczalnie ze względu na dość małe praktyczne znaczenie tego zjawiska. Brak jest również ogólnie dostępnych programów komputerowych w tym zakresie.

Ze względu na prowadzenie badań eksperymentalnych przegonionych fal detonacyjnych w kanałach celowe stało się opracowanie także odpowiedniej metody obliczeniowej dla tego zjawiska, a także programu komputerowego.

Fale przegonione mają w warunkach rzeczywistych charakter nieustalony. Podany w tej pracy model fali jest ustalony, a więc umożliwia on obliczanie tylko lokalnych parametrów termodynamicznych spalin dla określonej, chwilowej wartości prędkości przegonionej fali detonacyjnej.

1. MODEL MATEMATYCZNY

Przedmiotem rozważań jest jednowymiarowa płaska fala spalania poruszająca się w kanale o stałym przekroju poprzecznym (rys.1). Fala spalania porusza się w lewo ze stałą prędkością u_1 . W układzie współrzędnych związanych z poruszającą się falą, stacjonarna mieszanina palna znajdująca się przed falą porusza się z prędkością u_1 w kierunku fali. Na rysunku 1 indeks 1 odnosi się do mieszaniny palnej przed falą, natomiast indeks 2 oznacza warunki w spalinach za falą. Prędkości u_1 i u_2 definiuje się względem układu współrzędnych związanego ze stacjonarną falą spalania.



Rys.1. Schemat stacjonarnej przegoniętej fali detonacyjnej

Równania zachowania dla jednowymiarowego przepływu ustalonego, przy zaniedbaniu sił masowych, bez dostarczania ciepła z zewnątrz i bez strat ciepła, mają postać:

- równanie ciągłości:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (1.1)$$

- równanie pędu:

$$\rho u \frac{du}{dx} = - \frac{dp}{dx} + \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{4}{3} \mu + \mu' \right) \frac{du}{dx} \right] \quad (1.2)$$

- równanie energii:

$$\rho u \left[\frac{d}{dx} \left(h + \frac{u^2}{2} \right) \right] = - \frac{d}{dx} q_p + \frac{d}{dx} \left[u \left(\frac{4}{3} \mu + \mu' \right) \frac{du}{dx} \right] \quad (1.3)$$

gdzie:

$$q_p = -\lambda \frac{dT}{dx} \quad (1.4)$$

$$h = c_p T + h^0 \quad (1.5)$$

Lepkość μ' jest zwykle bardzo mała i można ją zaniedbać.
Po scałkowaniu równań (1.1÷1.3) otrzymuje się

$$\varrho u = \text{const} = \dot{m} \quad (1.6)$$

$$\varrho u \frac{du}{dx} + u \frac{d}{dx} (\varrho u) = - \frac{dp}{dx} + \frac{d}{dx} \left(\frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx} \right) \quad (1.7)$$

Podstawiając (1.1) do (1.2) otrzymuje się:

$$\frac{d}{dx} \left(\varrho u^2 + p - \frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx} \right) = 0 \quad (1.8)$$

a po scałkowaniu:

$$\varrho u^2 + p - \frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx} = \text{const} \quad (1.9)$$

Równanie energii przyjmuje postać:

$$\varrho u \left(c_p T + h^o + \frac{1}{2} u^2 \right) - \lambda \frac{dT}{dx} - u \left(\frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx} \right) = \text{const} \quad (1.10)$$

Ponieważ $\frac{du}{dx}$ i $\frac{dT}{dx}$ są równe zero zarówno w strefie spalin jak i świeżej mieszankiny, to równania zachowania redukują się do postaci

$$\varrho_1 u_1 = \varrho_2 u_2 = \dot{m} \quad (1.11)$$

$$p_1 + \varrho_1 u_1^2 = p_2 + \varrho_2 u_2^2 \quad (1.12)$$

$$(c_p T)_1 + \frac{1}{2} u_1^2 + q = (c_p T)_2 + \frac{1}{2} u_2^2 \quad (1.13)$$

lub

$$h_1 + \frac{1}{2} u_1^2 = h_2 + \frac{1}{2} u_2^2 \quad (1.14)$$

i

$$p_2 = \varrho_2 R_2 T_2 \quad (1.15)$$

gdzie:

$$q = h_1^o - h_2^o \quad (1.16)$$

i

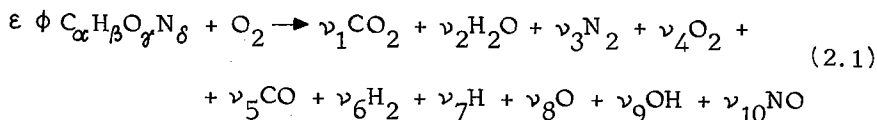
$$h^o = \sum_{i=1}^N x_i \Delta h_{f,i}^o \quad (1.17)$$

Cztery równania (1.11, 1.12, 1.14 i 1.15) zawierają pięć niewiadomych u_1 , u_2 , g_2 , T_2 i p_2 . Do rozwiązania zagadnienia konieczne jest więc zadanie wartości dla jednej z tych wielkości lub uzupełnienie układu o piąte równanie. W rozważanym tu przypadku obliczania parametrów za przegonią fala detonacyjną zadaje się prędkość fali, czyli u_1 . Przy obliczaniu samopodtrzymującej się ustalonej fali Chapmana-Jougueta układ równań uzupełnia się warunkiem styczności linii Rayleigha i Hugoniota.

2. RÓWNOWAGA CHEMICZNA

2.1. SFORMUŁOWANIE PROBLEMU

Przedmiotem rozważań jest równowaga chemiczna dla reakcji spalania paliwa o wzorze $C_\alpha H_\beta O_\gamma N_\delta$ w tlenie:



Bilans atomów dają następujące cztery równania:

$$C: \varepsilon \phi \alpha = (y_1 + y_5)N \quad (2.2)$$

$$H: \varepsilon \phi \beta = (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9)N \quad (2.3)$$

$$O: \varepsilon \phi \gamma + 2 = (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10})N \quad (2.4)$$

$$N: \varepsilon \phi \delta = (2y_3 + y_{10})N \quad (2.5)$$

gdzie: $N = \sum_{i=1}^{10} \nu_i$ oznacza całkowitą liczbę moli.

Z definicji, słuszne jest następujące równanie:

$$\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0 \quad (2.6)$$

Wprowadzenie sześciu stałych równowagi prowadzi do jedenastu równań dla dziesięciu nieznanymi udziałów molowych y_i oraz całkowitej liczby moli N . Jako reakcje, rozważmy następujące:

$$\frac{1}{2} \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} \quad K_1 = \frac{y_7^p^{1/2}}{y_6^{1/2}} \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} \quad K_2 = \frac{y_8^p^{1/2}}{y_4^{1/2}} \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{2} \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} \quad K_3 = \frac{y_9}{y_4^{1/2} y_6^{1/2}} \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{2} \text{O}_2 + \frac{1}{2} \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{NO} \quad K_4 = \frac{y_{10}}{y_4^{1/2} y_3^{1/2}} \quad (2.10)$$

$$\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} \quad K_5 = \frac{y_2}{y_4^{1/2} y_6^p^{1/2}} \quad (2.11)$$

$$\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 \quad K_6 = \frac{y_1}{y_5 y_4^{1/2} p^{1/2}} \quad (2.12)$$

Wykorzystanie stałych równowagi jest równoznaczne z maksymalizacją entropii gazu. Po obliczeniu składu mieszaniny w stanie równowagi można obliczyć odpowiednie parametry termodynamiczne, takie jak entalpia, entropia, objętość właściwa i energia wewnętrzna. W podanym poniżej p.2.2 omówiono metodę rozwiązania 11 równań nieliniowych (2.2÷2.12) z 11 niewiadomymi.

2.2. METODA ROZWIĄZANIA

Omówiona poniżej metoda została opracowana przez Olikarę i Bormanę [10]. Jednostką ciśnienia w sześciu równaniach (2.7÷2.12) jest atm. Olikara i Borman wykonali aproksymację wielomianową stałych równowagi zawartych w postaci danych liczbowych w tablicach JANAF [11]. Wielomian aproksymacyjny, który opracowali, ma postać:

$$\log K_p = A \ln \left(\frac{T}{1000} \right) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (2.13)$$

gdzie T jest wyrażona w K. Wartości stałych A , B , C , D i E dla zakresu temperatur $600 < T < 4000$ K podane są w tabl.1.

Tablica 1

Wartości stałych wielomianu aproksymacyjnego (2.13)

	A	B	C	D	E
K ₁	0,432 160 E + 00	-0,112 464 E + 05	0,267 269 E + 01	-0,745 744 E - 04	0,242 484 E - 08
K ₂	0,310 805 E + 00	-0,129 540 E + 05	0,321 779 E + 01	-0,738 336 E - 04	0,344 645 E - 08
K ₃	-0,141 784 E + 00	-0,213 308 E + 04	0,853 461 E + 00	0,355 015 E - 04	-0,310 227 E - 08
K ₄	0,150 879 E - 01	-0,470 959 E + 04	0,646 096 E + 00	0,272 805 E - 05	-0,154 444 E - 08
K ₅	-0,752 364 E + 00	0,124 210 E + 05	-0,260 286 E + 01	0,259 556 E - 03	-0,162 687 E - 07
K ₆	-0,415 302 E - 02	0,148 627 E + 05	-0,475 746 E + 01	0,124 699 E - 03	-0,900 227 E - 08

Tablica 2

Udziały molowe (mol/mol powietrza) produktów spalania w niskiej temperaturze

i	Składnik	$\Phi \leq 1$	1
1	CO ₂	$\alpha \Phi \varepsilon$	$\alpha \Phi \varepsilon - \nu_5$
2	H ₂ O	$\beta \Phi \frac{\varepsilon}{2}$	$0,42 - \Phi E(2\alpha - \gamma) + \nu_5$
3	N ₂	$0,79 + \delta \frac{\varepsilon}{2} - \Phi$	$0,79 + \delta \Phi \frac{\varepsilon}{2}$
4	O ₂	$0,21(1 - \Phi)$	0
5	CO	0	ν_5
6	H ₂	0	$0,42(\Phi - 1) - \nu_5$

Równania na stałe równowagi można przekształcić w celu wyrażenia udziałów molowych wszystkich składników w funkcji y_3, y_4, y_5 i y_6 , tzn. udziałów molowych N_2, O_2, CO i H_2 :

$$y_7 = c_1 y_6^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_1 = \frac{K_1}{p^{1/2}} \quad (2.14)$$

$$y_8 = c_2 y_4^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_2 = \frac{K_2}{p^{1/2}} \quad (2.15)$$

$$y_9 = c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_3 = K_3 \quad (2.16)$$

$$y_{10} = c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_4 = K_4 \quad (2.17)$$

$$y_2 = c_5 y_4^{1/2} y_6, \quad \text{gdzie} \quad c_5 = K_5 p^{1/2} \quad (2.18)$$

$$y_1 = c_6 y_4^{1/2} y_5, \quad \text{gdzie} \quad c_6 = K_6 p^{1/2} \quad (2.19)$$

Całkowita liczba moli może być wyeliminowana przez podzielenie równania (2.3) przez (2.2). W wyniku otrzymuje się:

$$2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9 - \frac{\beta}{\alpha} (y_1 + y_5) = 0 \quad (2.20)$$

Podobnie można podzielić równanie (2.4) i (2.5), co daje

$$2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10} - \left[\left(\gamma + \frac{2}{\varepsilon \phi} \right) \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (2.21)$$

$$2y_3 + y_{10} - \left[\delta \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (2.22)$$

Wprowadzając oznaczenia

$$d_1 = \frac{\beta}{\alpha}, \quad d_2 = \frac{\gamma}{\alpha} + \frac{2}{\varepsilon \phi \alpha}, \quad d_3 = \frac{\delta}{\alpha}$$

i podstawiając równania (2.14;2.19) do (2.20;2.22) oraz (2.6) otrzymuje się cztery równania dla czterech niewiadomych y_3, y_4, y_5 i y_6 . Wynikowe równania mają postać:

$$2c_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_6 + c_1 y_6^{1/2} + c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} - d_1 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \quad (2.23)$$

$$2c_6 y_4^{1/2} y_5 + c_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_4 + y_5 + c_2 y_4^{1/2} + c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} - d_2 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \quad (2.24)$$

$$2y_3 + c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} - d_3 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \quad (2.25)$$

$$c_6 y_4^{1/2} y_5 + c_5 y_4^{1/2} y_6 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + c_1 y_6^{1/2} + c_2 y_4^{1/2} + c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} - 1 = 0 \quad (2.26)$$

Cztery równania (2.23÷2.26) można ogólnie zapisać jako:

$$f_j(y_3, y_4, y_5, y_6) = 0 \quad \text{dla } j = 1, 2, 3, 4 \quad (2.27)$$

Przybliżone rozwiązanie równań (2.27) przedstawia tabl.2. Oznaczmy wektor (2.27) jako pierwsze przybliżenie

$$\left[y_3^{(1)}, y_4^{(1)}, y_5^{(1)}, y_6^{(1)} \right] \quad (2.28)$$

wektora rozwiązania dokładnego, który oznaczamy jako

$$(y_3^*, y_4^*, y_5^*, y_6^*) \quad (2.29)$$

Funkcje znajdujące się po lewej stronie równań (2.27) można rozwinąć w szereg Taylora w sąsiedztwie znanego wektora. Oznaczamy:

$$\Delta y_1 = y_1^* - y_1^{(1)} \quad (2.30)$$

Następnie, zaniedbując pochodne drugiego i wyższych rzędów, otrzymuje się cztery równania dla przybliżeń Δy_i ($i = 3, 4, 5, 6$):

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \Delta y_3 + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \Delta y_4 + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \Delta y_5 + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \Delta y_6 \approx 0 \quad (2.31)$$

Układ równań liniowych (2.31) można zapisać dla Δy_i ($i = 3, 4, 5, 6$) przy użyciu procedury macierzy wykorzystującej eliminację Gaussa. Drugie przybliżenie ma postać:

$$y_i^{(2)} = y_i^{(1)} + \Delta y_i, \quad i = 3, 4, 5, 6. \quad (2.32)$$

Wykorzystując drugie przybliżenie jako nowe pierwsze przybliżenie, powtarza się procedurę aż do chwili, gdy zmiany f_j są dostatecznie małe, tzn.

$$|\Delta y_i| \leq \xi \ll 1 \quad (2.33)$$

gdzie ξ jest pewną zadaną dokładnością. Nie stosuje się w tym wypadku wielkości względnych, ponieważ niektóre wielkości y_i mogą być mniejsze niż błąd obcięcia. Tak więc nie można mieć pewności, że $|\Delta y_i| \ll y_i^{(2)}$ dla każdego składnika.

Dla wygody zdefiniujemy następujące pochodne cząstkowe:

$$D_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial y_j} \quad \begin{matrix} i=1,2,7,8,9,10 \\ j=3,4,5,6 \end{matrix}$$

$$D_{jj} = \frac{\partial y_j}{\partial y_j} = 1$$

Z równań (2.14÷2.19) otrzymuje się następujące pochodne:

$$D_{76} = \frac{1}{2} \frac{c_1}{y_6^{1/2}}, \quad D_{103} = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}}$$

$$D_{84} = \frac{1}{2} \frac{c_1}{y_4^{1/2}}, \quad D_{26} = c_5 y_4^{1/2}$$

$$D_{94} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_6^{1/2}}{y_4^{1/2}}, \quad D_{24} = \frac{1}{2} \frac{c_5 y_6}{y_4^{1/2}}$$

$$D_{96} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_4^{1/2}}{y_6^{1/2}}, \quad D_{14} = \frac{1}{2} \frac{c_6 y_5}{y_4^{1/2}}$$

$$D_{104} = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_3^{1/2}}{y_4^{1/2}}, \quad D_{15} = c_6 y_4^{1/2}$$

Jeżeli zapisze się równania (2.31) w postaci macierzowej $[A][Z] - [B] = 0$, elementy macierzy przyjmą postać:

$$[B] = [-f]$$

$$[Z] = [\Delta y]$$

oraz

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial y_3} = 1 + D_{103}$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial y_4} = D_{14} + D_{24} + 1 + D_{84} + D_{104} + D_{94}$$

$$A_{13} = \frac{\partial f_1}{\partial y_5} = D_{15} + 1$$

$$A_{14} = \frac{\partial f_1}{\partial y_6} = D_{26} + 1 + D_{76} + D_{96}$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial y_3} = 0$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial y_4} = 2D_{24} + D_{94} - d_1 D_{14}$$

$$A_{23} = \frac{\partial f_2}{\partial y_5} = -d_1 D_{15} - d_1$$

$$A_{24} = \frac{\partial f_2}{\partial y_6} = 2D_{26} + 2 + D_{76} + D_{96}$$

$$A_{31} = \frac{\partial f_3}{\partial y_3} = D_{103}$$

$$A_{32} = \frac{\partial f_3}{\partial y_4} = 2D_{14} + D_{24} + 2 + D_{84} + D_{94} + D_{104} - d_2 D_{14}$$

$$A_{33} = \frac{\partial f_3}{\partial y_5} = 2D_{15} + 1 - d_2 D_{15} - d_2$$

$$A_{34} = \frac{\partial f_3}{\partial y_6} = D_{26} + D_{96}$$

$$A_{41} = \frac{\partial f_4}{\partial y_3} = 2 + D_{103}$$

$$A_{42} = \frac{\partial f_4}{\partial y_4} = D_{104} - d_3 D_{14}$$

$$A_{43} = \frac{\partial f_3}{\partial y_5} = d_3 D_{15} - d_3$$

$$A_{44} = \frac{\partial f_4}{\partial y_6} = 0$$

Rozwiązanie równania macierzowego $[A][\Delta y] + [f] = 0$ dostarcza wartości Δy_i potrzebnych w równaniu (2.32).

W celu obliczenia równowagowej wartości ciepła właściwego konieczna jest znajomość zmiany udziałów molowych na skutek zmiany temperatury. Niezbędne jest wyznaczenie czterech niezależnych od siebie pochodnych

$$\frac{\partial y_i}{\partial T}, \quad i = 3, 4, 5, 6$$

ponieważ pozostałe pochodne można wyrazić przy ich użyciu:

$$\frac{\partial y_7}{\partial T} = y_6^{1/2} \frac{\partial c_1}{\partial T} + D_{76} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial y_8}{\partial T} = y_4^{1/2} \frac{\partial c_2}{\partial T} + D_{84} \frac{\partial y_4}{\partial T} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial y_9}{\partial T} = y_4^{1/2} y_6^{1/2} \frac{\partial T_3}{\partial T} + D_{94} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{96} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial y_{10}}{\partial T} = y_4^{1/2} y_3^{1/2} \frac{\partial c_4}{\partial T} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial T} = y_4^{1/2} y_6 \frac{\partial c_5}{\partial T} + D_{24} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{26} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial T} = y_4^{1/2} y_5 \frac{\partial c_6}{\partial T} + D_{14} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{15} \frac{\partial y_5}{\partial T} \quad (2.39)$$

Zbiór niezależnych od siebie pochodnych otrzymuje się poprzez rozwiązanie równania macierzowego będącego wynikiem zróżniczkowania równania (2.27) względem T:

$$\frac{\partial f_j}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \frac{\partial y_3}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \frac{\partial y_4}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \frac{\partial y_5}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \frac{\partial y_6}{\partial T} = 0, \quad (2.40)$$

$$j = 1, 2, 3, 4$$

W postaci macierzowej

$$[A] \left[\frac{\partial y}{\partial T} \right] + \left[\frac{\partial f}{\partial T} \right] = 0 \quad (2.41)$$

gdzie macierz A jest identyczna do użytej poprzednio w procesie iteracyjnym Newtona-Raphsona. W celu obliczenia $\partial f/\partial T$ zdefiniujemy:

$$x_i = \frac{y_i}{c_{i-6}}, \quad \text{gdzie} \quad i = 7, 8, 9, 10$$

$$x_1 = \frac{y_1}{c_6} \quad (2.42)$$

$$x_2 = \frac{y_2}{c_5}$$

Z równań (2.14÷2.19) wynika, że x_i są funkcjami tylko y_i dla $i = 3, 4, 5, 6$.

Podstawienie x_i do równań (2.20÷2.22) oraz (2.6) oraz następne zróżniczkowanie względem T daje:

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} = \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 + \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_1}{\partial T} x_7 + \frac{\partial c_2}{\partial T} x_8 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 + \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T} = 2 \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_1}{\partial T} x_7 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 - d_1 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_3}{\partial T} = & 2 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 + \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_2}{\partial T} x_8 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 + \\ & + \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} - d_2 \frac{\partial c_6}{\partial T} \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial T} = \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} - d_3 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 \quad (2.46)$$

Z zależności na c_1 otrzymuje się:

$$\frac{\partial c_1}{\partial T} = \frac{1}{p} \frac{1}{1/2} \frac{dK_1}{dT}, \quad \frac{\partial c_4}{\partial T} = \frac{dK_4}{dT} \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial T} = \frac{1}{p} \frac{1}{1/2} \frac{dK_2}{dT}, \quad \frac{\partial c_5}{\partial T} = p^{1/2} \frac{dK_5}{dT} \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial T} = \frac{dK_3}{dT}, \quad \frac{\partial c_6}{\partial T} = p^{1/2} \frac{dK_6}{dT} \quad (2.49)$$

Z równania (3.13) wynika, że:

$$\frac{\partial K_i}{\partial T} = 2,302\,585 \, k_i \left[\frac{A}{T} - \frac{B}{T^2} + D + 2 \, ET \right] \quad (2.50)$$

Reaktywna mieszanina gazów doskonałych ma entalpię zależną od temperatury i ciśnienia. Z tego powodu pochodne cząstkowe względem ciśnienia należy także uwzględnić. Obliczenie ich jest analogiczne jak w przypadku temperatury. Wzory (2.34÷2.46) są identyczne po zastąpieniu $\partial/\partial T$ przez $\partial/\partial p$. Należy przy tym zauważyć, że c_3 i c_4 nie zależą od ciśnienia, a więc człony $\partial c_3/\partial p$ i $\partial c_4/\partial p$ są zerowe. Pozostałe pochodne mają postać:

$$\frac{\partial c_1}{\partial p} = -\frac{1}{2} \frac{c_1}{p} \quad \frac{\partial c_5}{\partial p} = \frac{1}{2} \frac{c_5}{p}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial p} = -\frac{1}{2} \frac{c_2}{p} \qquad \frac{\partial c_6}{\partial p} = \frac{1}{2} \frac{c_6}{p}$$

gdzie p jest w barach (lub dowolnie innych jednostkach, jednak w równaniach (2.14÷2.19) p musi być w atmosferach).

Rozwiązanie wszystkich tych równań, począwszy od (2.39) daje wartości $\partial y_i / \partial T$ i $\partial y_i / \partial p$ dla $i = 1, \dots, 10$. Metoda rozwiązania jest analogiczna jak dla y_i .

Pochodne termodynamiczne mają postać:

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^{10} \left(y_i c_{pi} + h_i \frac{\partial y_i}{\partial T} \right) - \frac{h M_T}{M} \right] \quad (2.51)$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_p = 1 - \frac{T M_T}{M} \quad (2.52)$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T = -1 - \frac{p M_p}{M} \quad (2.53)$$

gdzie:

$$M_T = \frac{\partial M}{\partial T} = \sum_{i=1}^{10} M_i \frac{\partial y_i}{\partial T} \quad (2.54)$$

$$M_p = \frac{\partial M}{\partial p} = \sum_{i=1}^{10} M_i \frac{\partial y_i}{\partial p} \quad (2.55)$$

Do obliczania ciepła właściwego i entalpii składników wykorzystuje się aproksymacje wielomianowe danych tabelarycznych. Funkcje te mają postać:

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (2.56)$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (2.57)$$

Wartości stałych $a_1 \div a_6$ są podane w tabl.3. Temperaturą odniesienia jest tu 298 K.

Omówioną metodę obliczania składu równowagowego mieszaniny gazów realizuje w programie procedura ECP.

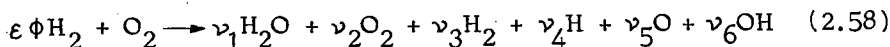
Tablica 3

Współczynniki wielomianów obliczeniowych ciepła właściwego, entalpii i entropii w funkcji temperatury; $300 < T < 4000$ K [8]

Lp.	Gaz	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{15}	a_{16}	a_{17}
1	CO ₂	0,44608041E+01	0,30981719E-02	-0,12392571E-05	0,2274135E-09	-0,15525954E-13	-0,48961442E+05	-0,98635982E+00
2	H ₂ O	0,27167633E+01	0,29451374E-02	-0,80224374E-06	0,1022668E-09	-0,48472143E-14	-0,29905826E+05	0,66305671E+01
3	N ₂	0,28963194E+01	0,15154866E-02	-0,57235277E-06	0,99807393E-10	-0,65223553E-14	-0,90586184E+03	0,61615148E+01
4	O ₂	0,36219535E+01	0,73618264E-03	-0,19652228E-06	0,36201558E-10	-0,28945627E-14	-0,12019825E+04	0,36150960E+01
5	CO	0,29840696E+01	0,14891390E-02	-0,57899684E-06	0,10364377E-09	-0,69353550E-14	-0,14245228E+05	0,63479156E+01
6	H ₂	0,31001901E+01	0,51119464E-03	0,52644210E-07	-0,34909973E-10	0,36945343E-14	-0,87738042E+03	-0,19629421E+01
7	H	0,25000000E+01	0,0	0,0	0,0	0,0	0,25471627E+05	-0,46011763E+00
8	O	0,55420596E+01	-0,27550619E-04	-0,31028033E-03	0,45510674E-11	-0,43680515E-15	0,29230803E+05	0,49203080E+01
9	OH	0,29106427E+01	0,95931650E-03	-0,19441702E-03	0,13756646E-10	0,14224542E-15	0,39355381E+04	0,54423445E+01
10	NO	0,31890000E+01	0,13382281E-02	-0,52899318E-06	0,95919332E-10	-0,64847932E-14	0,98283290E+04	0,67458112E+01

2.3. MIESZANINY WODOROWO-TLENOWE

W przypadku mieszanin wodorowo-tlenowych należy zmodyfikować model równowagowy przedstawiony w p.2.1. Wynika to stąd, że współczynnik $\alpha = 0$ i wielkości d_1 , d_2 i d_3 stają się nieskończenie duże. Równanie reakcji spalania wodoru w tlenie przyjmuje postać:



Bilans atomów daje następujące równania:

$$\text{H:} \quad 2\varepsilon\phi = (2y_1 + 2y_3 + y_4 + y_6)N \quad (2.59)$$

$$\text{O:} \quad 2 = (y_1 + 2y_2 + y_5 + y_6)N \quad (2.60)$$

gdzie $N = \sum_{i=1}^6 \nu_i$ jest całkowitą liczbą moli.

Z definicji mamy też

$$\sum_{i=1}^6 y_i - 1 = 0 \quad (2.61)$$

Dzielimy (2.59) przez (2.60) otrzymujemy

$$\frac{2y_1 + 2y_3 + y_4 + y_6}{y_1 + 2y_2 + y_5 + y_6} = \frac{2\varepsilon\phi}{2} \quad (2.62)$$

Podstawiając

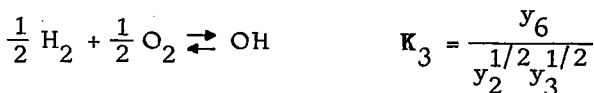
$$d_1 = \varepsilon\phi \quad (2.63)$$

otrzymuje się po przekształceniach równanie:

$$(2 - d_1)y_1 + 2y_3 - 2d_1y_2 - d_1y_5 + y_6(1 - d_1) + y_4 = 0 \quad (2.64)$$

W rozważanym przypadku aktualne są następujące cztery reakcje równowagowe:





Z równań na stałe równowagi otrzymuje się

$$y_4 = c_1 y_3^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_1 = \frac{K_1}{p^{1/2}}$$

$$y_5 = c_2 y_2^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_2 = \frac{K_2}{p^{1/2}}$$

$$y_6 = c_3 y_2^{1/2} y_3^{1/2}, \quad \text{gdzie} \quad c_3 = K_3$$

$$y_1 = c_4 y_2^{1/2} y_3, \quad \text{gdzie} \quad c_4 = K_4 p^{1/2}$$

Podstawiając powyższe zależności do równań (2.61) i (2.64) otrzymuje się:

$$(2 - d_1) c_4 y_2^{1/2} y_3 - 2d_1 y_2 + 2y_3 + c_1 y_3^{1/2} - d_1 c_2 y_2^{1/2} + \\ + (1 - d_1) c_3 y_2^{1/2} y_3^{1/2} = 0 \quad (2.65)$$

$$c_4 y_2^{1/2} y_3 + y_2 + y_3 + c_1 y_3^{1/2} + c_2 y_2^{1/2} + \\ + c_3 y_2^{1/2} y_3^{1/2} - 1 = 0 \quad (2.66)$$

Równania (2.65) i (2.66) są odpowiednikami równań (2.27) i rozwiązuje się je analogicznie. Współczynniki macierzy $[A]$ mają teraz postać:

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial y_2} = (2 - d_1)D_{12} - 2d_1 - d_1 D_{52} + (1 - d_1)D_{62}$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial y_3} = (2 - d_1)D_{13} + 2 + D_{43} + (1 - d_1)D_{63}$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial y_2} = D_{12} + 1 + D_{52} + D_{62}$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial y_3} = D_{13} + 1 + D_{43} + D_{63}$$

gdzie:

$$D_{43} = \frac{1}{2} \frac{c_1}{y_3^{1/2}}, \quad D_{52} = \frac{1}{2} \frac{c_2}{y_2^{1/2}}$$

$$D_{62} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_3^{1/2}}{y_2^{1/2}}, \quad D_{63} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_2^{1/2}}{y_3^{1/2}}$$

$$D_1 = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_3}{y_2^{1/2}}, \quad D_{13} = c_4 y_2^{1/2}$$

Pozostałe wzory wyprowadza się analogicznie jak dla przypadku spalania węglowodoru.

3. METODA ROZWIĄZANIA MODELU

Z równań (1.11), (1.12) i (1.15) po odpowiednich podstawieniach i przekształceniach otrzymuje się równanie

$$u_1^2 = \frac{P_2 - P_1}{\varrho_1 \left(1 - \frac{\varrho_1}{\varrho_2}\right)} = \frac{P_2 - P_1}{\frac{P_1 R_2 T_2}{P_2 T_1 R_1} \left(\frac{P_2}{R_2 T_2} - \frac{P_1}{R_1 T_1}\right)} = f_1(T_2, P_2) \quad (3.1)$$

Podobnie z równań (1.11), (1.14) i (1.15) otrzymuje się

$$u_1^2 = \frac{h_2 - h_1}{\frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 \right]} = \frac{2(h_2 - h_1)}{1 - \left(\frac{P_1 R_2 T_2}{R_1 T_1 P_2} \right)^2} = f_2(T_2, P_2) \quad (3.2)$$

Przyrównując do siebie prawe strony równań (3.1) i (3.2) otrzymuje się równanie umożliwiające obliczenie T_2 przy założeniu p_2 i R_2 . Ma ono postać:

$$T_2 = \frac{A^2 C D + \sqrt{\Delta}}{2A^2 B U^2} \quad (3.3)$$

gdzie:

$$A = \frac{P_1}{R_1 T_1}$$

$$B = p_2 - p_1$$

$$C = 2(h_2 - h_1)$$

$$D = \frac{R_2}{p_2}$$

$$\Delta = A^4 C^2 D^2 - 4A^2 B D^2 (AC - B)$$

Iteracyjna metoda rozwiązania modelu składa się z następujących kroków:

- 1) założenie p_2 ;
- 2) założenie T_2 ;
- 3) obliczenie równowagi chemicznej dla przyjętych p_2 i T_2 oraz obliczenie ze składu równowagowego R_2 i h_2 ;
- 4) obliczenie T_2^* z równania (3.3);
- 5) porównanie T_2^* z przyjętym T_2 ; jeśli różnica jest większa od dopuszczalnej - powrót do punktu 2 i powtórzenie obliczeń;
- 6) obliczenie u_1^* z równania (3.1) lub (3.2);
- 7) porównanie u_1^* z założoną do obliczeń prędkością detonacji $D = u_1$; jeśli różnica jest większa od dopuszczalnej - powrót do punktu 1 i powtórzenie obliczeń;

8) obliczenie gęstości

$$\rho_2 = \frac{p_2}{R_2 T_2}$$

oraz prędkości

$$u_2 = \frac{\rho_1}{\rho_2} u_1$$

Przedstawiony algorytm obliczeniowy realizuje program napisany w języku FORTRAN (omówiony w następnym rozdziale).

4. PROGRAM KOMPUTEROWY

Program komputerowy DEFAST służy do obliczania parametrów termodynamicznych spalin za przegonioną falą detonacyjną w mieszaninach wodoru, metanu, acetyleny, etanu, etylenu i propanu z tlenem.

Program został napisany w języku FORTRAN. Składa się z bloku głównego i procedury ECP obliczającej parametry równowagowe przy zadanej temperaturze i ciśnieniu. Program wykorzystuje procedurę biblioteczną LEQT2F, z biblioteki IMSL, służącą do rozwiązywania układu równań liniowych. Wprowadzanie danych odbywa się interakcyjnie z klawiatury komputera PC po pojawieniu się odpowiednich pytań na monitorze. Podczas wykonywania obliczeń na ekranie wyświetlane są wartości ciśnienia, temperatury i prędkości gazu dla kolejnych iteracji ciśnienia. Po odblokowaniu odpowiedniej instrukcji możliwe jest również śledzenie iteracji temperatury dla zadanych wartości ciśnienia. Po zakończeniu iteracji na ekranie monitora wyświetlane są wyniki obliczeń. Wyniki te, oraz dane początkowe, zapisane są również w oddzielnym zbiorze o nazwie DEFAST.RES. W przypadku dokonywania zmian w programie źródłowym, po kompilacji, w fazie łączenia konieczne jest dołączenie segmentu biblioteki IMSL o nazwie LINEQD.

4.1. DANE WEJŚCIOWE

W celu przeprowadzenia obliczeń parametrów za przegonioną falą detonacyjną konieczne jest wprowadzenie następujących danych:

- prędkość fali detonacyjnej $D = u_1$;
- ciśnienie początkowe p_1 ;
- temperatura początkowa T_1 ;

- rodzaj paliwa: obecna wersja programu umożliwia przeprowadzanie obliczeń dla wodoru (H_2), metanu (CH_4), acetyleny (C_2H_2), etylenu (C_2H_4), etanu (C_2H_6) i propanu (C_3H_8);
- skład molowy mieszaniny palnej.

Program wymaga także zadania szacunkowych wartości temperatury i ciśnienia za falą detonacyjną jako wartości startowych iteracji. Wprowadzanie danych odbywa się interakcyjnie z klawiatury po wyświetleniu odpowiedniego zapytania na monitorze.

4.2. WYNIKI OBLICZEŃ

Program umożliwia obliczenie następujących wielkości:

- temperatura za falą detonacyjną T_2 ,
- ciśnienie za falą detonacyjną p_2 ,
- gęstość za falą detonacyjną ρ_2 ,
- stosunek temperatur za i przed falą T_2/T_1 ,
- stosunek ciśnień za i przed falą p_2/p_1 ,
- stosunek gęstości za i przed falą ρ_2/ρ_1 ,
- masa cząsteczkowa spalin za falą M_2 ,
- prędkość gazu za falą względem fali detonacyjnej u_2 ,
- prędkość gazu za falą względem ścian kanału v_2 .

Wyniki te pojawiają się na ekranie monitora po zakończeniu obliczeń oraz zapisane są w oddzielnym zbiorze DEF.AST.RES.

4.3. PRZYKŁAD OBLICZENIOWY

W tabelicy 4 przedstawiono wyniki obliczeń (zawartość zbioru wyników DEF.AST.RES) dla przypadku przegonionej fali detonacyjnej o prędkości 3000 m/s rozprzestrzeniającej się w stechiometrycznej mieszaninie wodorowo-tlenowej o ciśnieniu 0,1 MPa i temperaturze 293 K. Dla porównania odpowiednie parametry samopodtrzymującej się fali detonacyjnej Chapmana-Jougueta, obliczone przy użyciu programu STANJAN [9], są następujące:

- temperatura $T_2 = 3683,50$ K;
- ciśnienie $p_2 = 1,924$ MPa;
- gęstość $\rho_2 = 0,9097$ kg/m³;
- stosunek temperatur $T_2/T_1 = 12,57$;
- stosunek ciśnień $p_2/p_1 = 19,24$;
- stosunek gęstości $\rho_2/\rho_1 = 1,821$;

- masa cząsteczkowa $M_2 = 14,478$ kg/kmol;
- prędkość fali $D = 2843$ m/s.

Tablica 4

Wyniki obliczeń

Input data:	Type of fuel	IFU= 1
	Temperature (K)	T1= 293.00
	Pressure (MPa)	P1= .10
	Mols of fuel	A1= 2.0
	Mols of oxygen	A2= 1.0
	Molecular weight	WF= 12.0107
	Oxygen excess coeff.	LAM= 1.00
	Density (kg/m**3)	RO1= .4930
	Enthalpy (kJ/kg)	H1= -4.09
	Detonation velocity (m/s)	D= 3000.0
RESULTS:		
	Temperature (K)	T2= 3799.14
	Pressure (MPa)	P2= 2.841
	Density (kg/m**3)	RO2= 1.2894
	Enthalpy (kJ/kg)	H2= 3837.92
	Molecular weight	M2= 14.3381
		T2/T1= 12.9664
		P2/P1= 28.4050
		RO2/RO1= 2.6152
	Velocity with respect to detonation wave (m/s)	U2= 1147.14
	Velocity with respect to channel walls (m/s)	V2= 1852.86

BIBLIOGRAFIA

- [1] Y.B. Zeldowicz: The Theory of the Propagation of Detonation in Gaseous Systems. Expt. Theor. Phys. SSSR, Vol.10, p.5542, 1940.
- [2] L.E. Bollinger, R. Edse: Thermodynamic Calculations of Hydrogen-Oxygen Detonation Parameters for Various Initial Pressures. ARS J., Vol. 33, 1961, 251-256.
- [3] C.L. Eisen, R.A. Gross, T.J. Rivlin: Theoretical Calculations in Gaseous Detonations. TN 58-326, Office of Scientific Research, March 15, 1958.
- [4] F.J. Zeleznik, S. Gordon: Calculation of Detonation Properties and Effect of Independent Parameters on Gaseous Detonations. ARS J., Vol. 32, No. 4, pp.606-615, 1962.

- [5] P.F. Bird, R.E. Duff, G.L. Schott: HUG, a FORTRAN-FAR Code for Computing Normal Shock and Detonation Wave Parameters in Gases. Los Alamos Kinetic Laboratory Report A-2980, 1964.
- [6] T. Fujiwara, S. Tsuge: Quasi-one-dimensional Analysis of Gaseous Free Detonation. J. Phys. Soc. Japan 33 (1972).
- [7] Ju.A. Nikolajev, M.E. Topchian: Rasczot rawnowiesnych tieczenijs w dietonacionnych wołnach w gazach. Fizika Gorenija i Wzrywa 13 (1977), No. 3.
- [8] S. Gordon, B.J. Mc. Bride: Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Schocks, and Chapman-Jouguet Detonations. NASA SP-275, 1971.
- [9] W.C. Reynolds: STANJAN - Computer Program for Equilibrium Analysis, Stanford University, 1981.
- [10] C. Olikara, G.L. Borman: A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Applications to I.C. Engines. SAE Paper 750468, Society of Automotive Engineers, Detroit 1975.
- [11] JANAF Thermochemical Tables, National Bureau of Standards Publication NSRDS-NBS37, 1971.

COMPUTATIONS OF THERMODYNAMIC PARAMETERS
OF COMBUSTION PRODUCTS BEHIND OVERDRIVEN
DETONATION WAVE

Summary

A detailed description of the computational model of thermodynamic parameters of the combustion products behind overdriven detonation wave is presented. The model is based on one-dimensional steady flow model with the negligence of body forces, without heat addition and without heat and momentum losses. The model calculates chemical and thermodynamic equilibrium state of the combustion products for the combustion of hydrogen or any hydrocarbon in oxygen. A detailed description of the iterative solution procedure of the model and computer program DEFAST executing this solution are given. Illustrative example of the overdriven detonation wave in stoichiometric hydrogen-oxygen mixture with the initial pressure 0,1 MPa and temperature 293 K is also presented.

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ГАЗОВ СГОРАНИЯ ЗА ПЕРЕГНАННОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ

Р е з ю м е

В работе подробно представлено расчетную модель термодинамических параметров газов сгорания за перегнанной детонационной волной. Модель основана на одномерном стационарном течении, без учета массовых сил, без доставки тепла снаружи и без потерь. Модель учитывает состояние химического и термодинамического равновесия газов сгорания для реакции сгорания водорода или любого углеводорода в кислороде. Подробно описан итерационный метод решения модели а также компьютерную программу DEFAST реализующую это решение. Представлен также пример расчета для перегнанной детонационной волны в стехиометрической водородо-кислородной смеси с начальным давлением 0,1 МПа и температуре 293 К.