

Databases with parameters of the BKW EOS

Каждый файл с расширением BKW (*.bkw) представляет собой базу данных с параметрами уравнения состояния (УС) BKW для многокомпонентной газовой фазы.

УС BKW имеет следующий вид:

$$pV_M / RT = 1 + x \exp(\beta x), \quad (1)$$

$$x = \{ \kappa \sum \kappa_i \xi_i \} / \{ V_M (T + \theta)^\alpha \}, \quad (2)$$

где p - давление, V_M - мольный объем газовой фазы, R - универсальная газовая постоянная, T - температура, α , β , κ и θ - параметры, ξ_i - мольная доля i -го компонента газовой фазы, κ_i - коволюм для i -го компонента газовой фазы. Суммирование в формуле (2) производится по всем компонентам газовой фазы.

Каждый файл *.bkw имеет следующий формат.

В первой строке файла должны быть указаны 4 числовых поля, отделенных друг от друга любым количеством пробелов и (или) символов табуляции. Первое поле - значение параметра α . Второе поле - значение параметра β . Третье поле - значение параметра κ в $[m^3 kmol^{-1} K^\alpha]$. Последнее четвертое поле - значение параметра θ в [K].

В следующих строках, количество которых не ограничено, указываются значения коволюмов κ_i для каждого из возможных компонентов газовой фазы. Каждая из этих строк должна содержать по два поля, отделенных друг от друга любым количеством пробелов и (или) символов табуляции. Первое поле - текстовое, в нем указывается химическая формула вещества так, как это принято в TDS. Длина химической формулы не может превышать 31 символа. Второе поле - числовое, в нем указывается значение коволюма κ_j для данного вещества.

В любом месте файла *.bkw может присутствовать любое количество пустых строк.

Пример возможного содержимого файла *.bkw:

0.5	0.176	0.0118	1850
CH4	550.		
CO	440.		
CO2	610.		
H2	98.		
H2O	270.		
NH3	384.		
NO	386.		

N2	404.
O2	325.

Файлы MaderRDX.bkw и MaderTNT.bkw содержат два набора параметров УС ВКВ, найденные Мейдером [1], файл BkwR.bkw представляет собой набор ВКВ-R Фингера [2], в файле BkwC.bkw находится недавно опубликованный набор ВКВС [3].

REFERENCES

1. *Mader Ch.L.* Numerical Modeling of Detonation. Berkley - Los Alamos - London: California Press, 1977.
2. *Finger M. et al.* // Sixth Symposium (International) on Detonation. 1976. ACR-221. P. 710.
3. *Fried L.E., Souers P.C.* // Propellants, Explos., Pyrotech. 1996. V. 21. P. 215.