

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЕВА
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)»

В.С. ЕГОРЫЧЕВ

РАСЧЁТ РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА,
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ РАКЕТНЫХ
ТОПЛИВ СПК TERRA

Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет)» в качестве учебного пособия

САМАРА
Издательство СГАУ
2013

УДК 629.78(075)
ББК 39.6я7
Е 307

Рецензенты: главный конструктор ПФ ОАО «НПО
ЭНЕРГОМАШ им. академика В.П. Глушко»
И.А. Ганин,
канд. техн. наук, доц. В.А. Борисов.

Е 307 *Егорычев В.С.*
Расчёт равновесного состава, термодинамических и теплофизических свойств продуктов сгорания ракетных топлив СПК TERRA: учеб. пособие / В.С. Егорычев. – Самара: Изд-во СГАУ, 2013. – 56 с.

ISBN 978-5-7883-0953-8

В доступной для студентов форме изложена инструкция пользователя специализированным программным комплексом (СПК) TERRA, предназначенным для расчёта произвольных систем с химическими и фазовыми превращениями. СПК TERRA позволяет моделировать предельно равновесные состояния и реализует созданный в Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана метод и алгоритм расчёта.

СПК позволяет проводить термодинамический расчёт ЖРД, РДТТ, ГРД, работающих на любых химических ракетных топливах. Имеется возможность определять равновесный химический и фазовый состав рабочего тела, представляющего собой продукты сгорания ракетного топлива, рассчитывать его термодинамические и теплофизические свойства, параметры изоэнтропийного расширения рабочего тела и идеальные параметры ракетного двигателя.

Профессиональная компетенция требует приобретения умения и опыта практического использования студентами СПК TERRA для термодинамического расчёта и проектирования камеры ЖРД в курсовой работе по учебной дисциплине «Теория, расчёт и проектирование ракетных двигателей» и дипломном проектировании.

Предназначено для студентов факультета двигателей летательных аппаратов, обучающихся по направлению 160700 – Проектирование авиационных и ракетных двигателей, необходимо для выполнения курсового и дипломного проектирования.

УДК 629.78(075)
ББК 39.6я7

ISBN 978-5-7883-0953-8

© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2013

О Г Л А В Л Е Н И Е

ВВЕДЕНИЕ	4
1. Начало работы СПК TERRA	5
2. Задание исходного состава системы	7
3. Работа с базой данных простых веществ	10
4. Задание параметров равновесия	14
5. Вычисление полной энтальпии (внутренней энергии) системы ...	15
6. Ограничение списка индивидуальных веществ, рассматриваемых при проведении расчетов	18
7. Учет возможной частичной неравновесности рабочего тела.....	20
8. Расчет параметров равновесных состояний систем с использованием модели конденсированных растворов	23
9. Задание содержания химических элементов в двухкомпонентных ракетных топливах	27
10. Расчет параметров изоэнтропийного расширения продуктов сгорания в сопле	29
11. Сохранение исходных данных варианта в файле.....	33
12. Открытие файла с исходными данными	36
13. Запуск программы на выполнение.....	37
14. Представление равновесного состава, термодинамических и теплофизических свойств продуктов сгорания и идеальных параметров двигателя.....	39
15. Представление равновесных концентраций компонентов фаз....	49
Библиографический список	52

ВВЕДЕНИЕ

Специализированный программный комплекс (СПК) TERRA предназначен для расчета произвольных термодинамических систем с химическими и фазовыми превращениями. Он позволяет моделировать предельно равновесные состояния и реализует созданный в Московском государственном техническом университете им. Н.Э.Баумана метод и алгоритм расчета.

СПК TERRA имеет обширную базу данных свойств индивидуальных веществ. Это делает его пригодным для исследования произвольных по химическому составу ракетных топлив.

Предельное число химических элементов, из которых может состоять исследуемое топливо (система), равно пятидесяти; число конденсированных фаз, рассматриваемых в ходе одного расчета, ограничено двумястами, а количество компонентов газовой фазы в равновесных продуктах сгорания, представляющих собой индивидуальные вещества, может достигать восьмисот.

При проведении расчетов гетерогенных рабочих тел возможно использование двух следующих моделей:

- однокомпонентных несмешивающихся фаз;
- конденсированных растворов.

1. Начало работы СПК TERRA

В главном меню операционной системы WINDOWS компьютера *Пуск/Все Программы* должна быть найдена новая папка *Terra*. В этой папке находятся ярлыки (пиктограммы), связанные с СПК TERRA и INFO.

Для запуска СПК TERRA достаточно подвести указатель мыши к ее



ярлыку и нажать левую клавишу.

Упростить доступ к программе можно путем размещения ее ярлыка непосредственно на рабочем столе или в любой удобной для пользователя программой папке.

В результате вызова программы на экране компьютера появится основное окно программы, показанное на рис.1.



Рис. 1. Основное окно программы TERRA

Если «провести» указателем мыши по изображению окна или нажать в области окна левую клавишу мыши, то заставка сменится на активное изображение окна с совокупностью рабочих элементов программы (рис. 2).

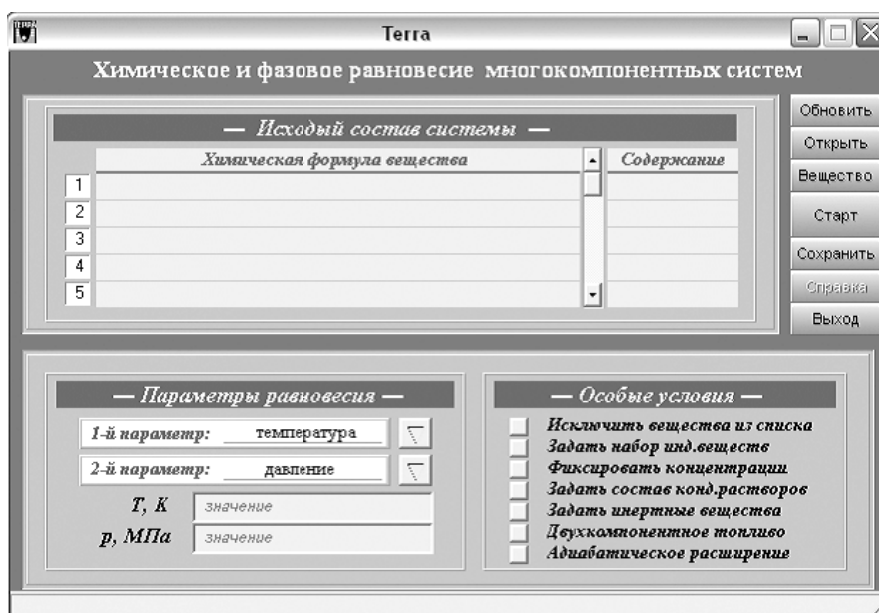


Рис. 2. Основное окно с совокупностью рабочих элементов программы

Основное окно разбито на три информационных панели и содержит в правой верхней части группу управляющих кнопок (рис. 2).

Панель — *Исходный состав системы* — предназначена для ввода и отображения информации о веществах, определяющих перечень и содержание в системе химических элементов, т.е. исходный химический состав ракетного топлива.

Панель — *Параметры равновесия* — служит для выбора тех двух параметров состояния, которые определяют химическое равновесие системы. Здесь же могут задаваться численные значения этих параметров и диапазон их изменения.

Панель — *Особые условия* — содержит управляющие кнопки, позволяющие изменять набор индивидуальных веществ, учитываемых при проведении расчетов, и формировать специальные требования к условиям моделирования.

Управляющие кнопки основного окна имеют следующие функции:
Обновить – очистка всех полей, предназначенных для ввода необходимой информации.

Открыть – открытие файла с исходными данными ранее подготовленного варианта расчета.

Вещество – организация доступа к пользовательской базе данных простых веществ, позволяющих упростить задание исходного состава системы.

Старт – инициирование вычислительного процесса.

Сохранить – сохранение подготовленного варианта исходных данных в файле.

Справка – вызов справочной информации

Выход – завершение работы СПК TERRA.

В настоящей версии СПК TERRA функция **Справка** явным образом не реализована. Несмотря на это оперативная инструкция по использованию СПК TERRA высвечивается в строке статуса состояния. Эта строка расположена в самой нижней части окна программы по всей его ширине. Строка статуса состояния содержит подсказку о функциональном назначении любого элемента управления, когда к нему подводится курсор. Пример высвечивания оперативной инструкции в строке статуса состояния показан на рис. 7.

2. Задание исходного состава системы

СПК TERRA моделирует *предельно равновесные состояния* сложных химических систем. Используемый в нём метод расчета не позволяет находить путь (траекторию) перехода к равновесному состоянию, т.е. описать кинетику протекания в системе химических реакций. Поэтому в качестве данных, определяющих исходный элементный состав системы, т.е. химический состав ракетного топлива применительно к ракетным двигателям, достаточно задавать только массовое содержание химических элементов.

Например, рассчитывая параметры равновесия, достигаемого в результате протекания химической реакции $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$, состав системы можно определить следующим образом:

1 моль С + 2 моля О + 2 моля Н или 12.011 г С + 32 г О + 2.016 г Н.

На панели — *Исходный состав системы* — в этом случае каждый химический элемент указывается слева в отдельной строке, а его массовое содержание – в правой части панели на том же уровне.

В СПК TERRA предполагается, что задается именно массовое содержание химического элемента в ракетном топливе.

После ввода этой информации панель исходного состава системы приобретает вид, показанный на рис.3.

— Исходный состав системы —	
Химическая формула вещества	Содержание
1 C	12.011
2 O	32
3 H	2.016
4	
5	

Рис. 3. Вид панели исходного состава системы после ввода информации

Нормировка массового содержания химических элементов и приведение его к 1 кг, 100% или единице не требуется. Это будет выполнено программно в ходе расчёта.

Нетрудно видеть, что в данном случае от пользователя потребовался предварительный пересчет мольного содержания химических элементов, содержащихся в CO и H₂O, в массовое их содержание. Эта процедура в случае сложных многоэлементных ракетных топлив (систем) может потребовать большого объема подготовительных расчетов, которые легко формализуются, поэтому в СПК TERRA предусмотрена возможность задания в каждой строке панели — *Исходный состав системы* — не только отдельных химических элементов, но и соединений, образованных ими. Эти соединения далее в настоящем учебном пособии будут называться простыми веществами, из которых изначально состоит требуемое ракетное топливо или исследуемая система.

Тот же исходный состав можно описать так, как это показано на рис. 4.

Формулы простых веществ записываются с использованием символов химических элементов, принятых в периодической системе Д.И. Менделеева, с учетом строчных и прописных букв. Стехиометрические коэффициенты записываются в строку, чтобы облегчить процедуру набора исходных данных. Стехиометрические коэффициенты, равные единице, могут опускаться.

— Исходный состав системы —	
Химическая формула вещества	Содержание
1 CO	28.01
2 H2O	18.016
3	
4	
5	

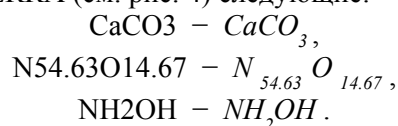
Рис. 4. Описание того же варианта исходного состава системы

Коэффициенты умножения при записи химических формул простых веществ не допускаются, например, $Al(OH)_2$. Вместо этого следует записать AlO_2H_2 .

Разрешено использовать дробные стехиометрические коэффициенты, например, $N_{54.63}O_{14.67}$. Никакие дополнительные признаки фазового, атомарного или ионного состояний при описании исходного состава системы не допускаются.

Возможность задания простых веществ лишь облегчает задание содержания химических элементов в ракетном топливе, т.е. **составляет** условную химическую формулу топлива.

Допустимые формы записи формул простых веществ в поле *Химическая формула вещества* панели — *Исходный состав системы* — основного окна СПК TERRA (см. рис. 4) следующие:



Количество зарезервированных строк для задания исходного состава системы равно пятидесяти. Номер строки отображается слева от поля, предназначенного для записи формулы простого вещества, а линейка прокрутки помещена посередине панели ввода исходного химического состава ракетного топлива и его компонентов (см. рис. 3 и 4).

Строки могут заполняться информацией в произвольном порядке. Между заполненными строками могут оставаться и пустые строки.

При массовых расчетах возникает потребность варьировать содержание исходных простых веществ, входящих в состав ракетного топлива. В настоящей версии СПК TERRA массовые части веществ можно задавать списком, где каждое новое значение отделено от предыдущего

запятой. Количество элементов в списке каждого из веществ должно быть одинаково. При проведении расчетов с вариацией состава молярное содержание элементов вначале определяется по первым значениям содержания всех веществ, затем – по вторым и т.д. Пример списочного задания состава показан на рис. 5. В нём предлагается провести расчеты для четырех вариантов состава.

	<i>Химическая формула вещества</i>	<i>Содержание</i>
1	CH4[-4650.1,2.225]	1, 2, 3, 4
2	N54.63014.67[0,1.012]	5, 4, 3, 2
3	N2	0.1, 0.1, 0.1, 0.1

Рис. 5. Пример списочного задания состава ракетного топлива

Допускается задание массового содержания простых веществ путем назначения интервала значений через пробел. Тогда тот же вариант исходных данных может быть задан иначе, как показано на рис. 6.

	<i>Химическая формула вещества</i>	<i>Содержание</i>
1	CH4[-4650.1,2.225]	1 - 4
2	N54.63014.67[0,1.012]	5 - 2
3	N2	0.1

Рис. 6. Пример возможного задания состава ракетного топлива

При задании интервала значений массового содержания простых веществ количество расчетных «точек» внутри интервала определяется программно и равно примерно пятидесяти. Если расчеты проводятся для ряда составов, одновременно допускается задание вариации только одного параметра состояния (но не более пяти точек), чтобы сохранить возможность построения двумерных графиков состава и параметров состояния.

3. Работа с базой данных простых веществ

При проведении массовых расчетов в любой проблемно ориентированной области знания часто приходится составлять большое число вариантов исходных данных, оперируя похожим набором простых ве-

ществ. Для работы с часто применяемыми простыми веществами в СПК TERRA создана открытая для расширения база данных.

Для вызова базы данных простых веществ необходимо нажать управляющую кнопку **Вещество** основного окна. Тогда панели — *Параметры равновесия* — и — *Особые условия* — будут перекрыты новой панелью — *Информация о простых веществах (база данных)* — (см. рис. 7).

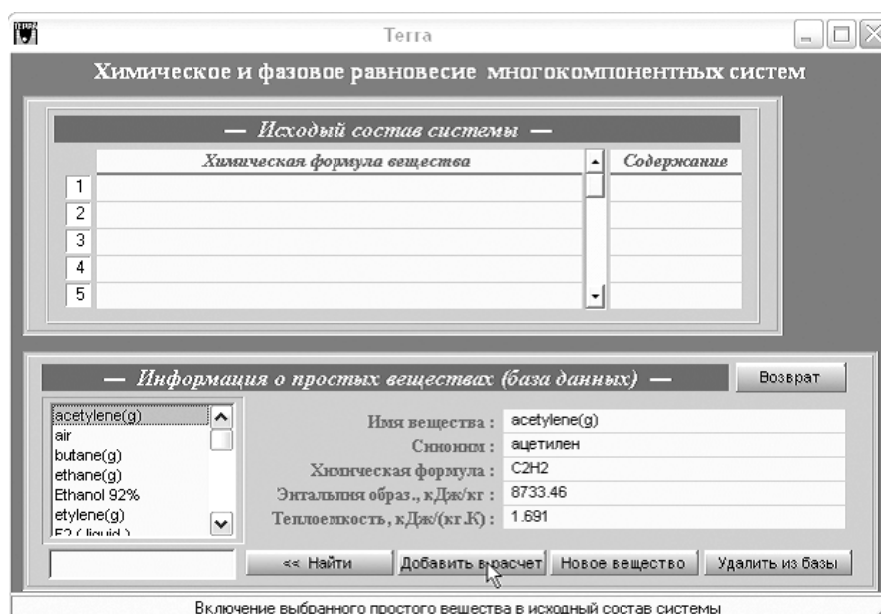


Рис. 7. Вид окна СПК TERRA при работе с базой данных простых веществ

Левое поле этой панели занято списком тех простых веществ, которые на данный момент уже были занесены в базу данных. С помощью указателя мыши, линейкой прокрутки или клавишами-стрелками можно найти и выделить любую строчку в предлагаемом списке.

В правом поле панели отображаются свойства выбранного вещества. Это имя вещества и синоним – параметры, используемые для идентификации и поиска; химическая формула – строка, сформированная для последующего включения в исходные данные расчета равновесия; энтальпия образования и теплоемкость – физико-химические свойства простого вещества.

Поиск вещества в базе может также производиться по одной или нескольким буквам, входящим в имя вещества. Для этого нужны символы (поисковый образ) набираются в поле редактирования в левом нижнем углу панели (см. рис. 7), после чего следует нажать управляющую кнопку **Найти**.

Нажатием управляющей кнопки **Добавить в расчет** выбранное простое вещество вносится в состав исходных данных, после чего панель — *Информация о простых веществах (база данных)* — закрывается, а на старое место возвращаются панели — *Параметры равновесия* — и — *Особые условия* — (рис. 8). Курсор при этом устанавливается в позицию, удобную для занесения содержания этого вещества в базу данных.

База данных простых веществ СПК TERRA открыта для расширения. Это означает, что любой пользователь может удалять из нее имеющиеся записи и вносить новые. Для удаления записи о простом веществе необходимо найти его имя в списке базы данных, а затем нажать управляющую кнопку с надписью **Удалить из базы** (см. рис. 7).

При попытке удаления какой-либо информации из базы данных простых веществ в пределах основного окна программы возникает новое окно, запрашивающее подтверждение удаления (рис. 9).

Для пополнения базы данных необходимо нажать управляющую кнопку **Новое вещество** (см. рис. 7). После этого поля для размещения данных очистятся и курсор остановится в строке ввода имени простого вещества (рис. 10).

Обязательными для заполнения являются имя индивидуального вещества и его химическая формула.

Имя вещества и его синоним могут задаваться произвольным образом, а химическая формула подвергается программной проверке на смысловую допустимость. После завершения ввода, для подтверждения записи в базу данных, достаточно нажать кнопку **ОК**, а для возврата в основное окно — кнопку **Отмена**.

Закрытие панели — *Информация о простых веществах (база данных)* — (см. рис. 7) производится либо в результате добавления простого вещества в исходные данные, либо путем нажатия кнопки **Возврат** в правом верхнем углу панели. Необходимо отметить, что пока панель с информацией о простых веществах активна, все остальные управляющие элементы с основного окна удалены и не могут быть задействованы. Недоступна и клавиша завершения работы СПК TERRA.

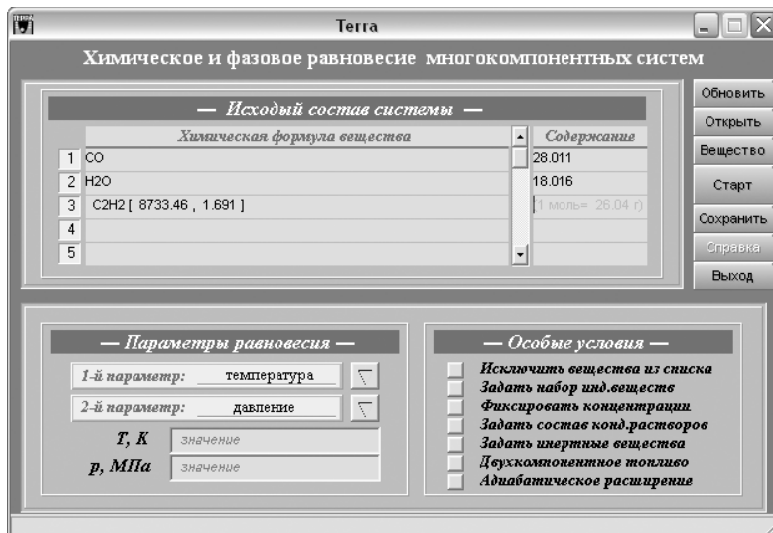


Рис. 8. Пример возможного задания состава системы

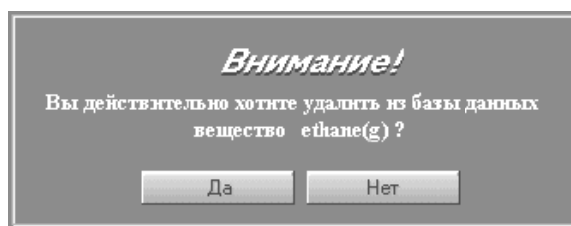


Рис. 9. Окно подтверждения удаления информации из базы данных простых веществ

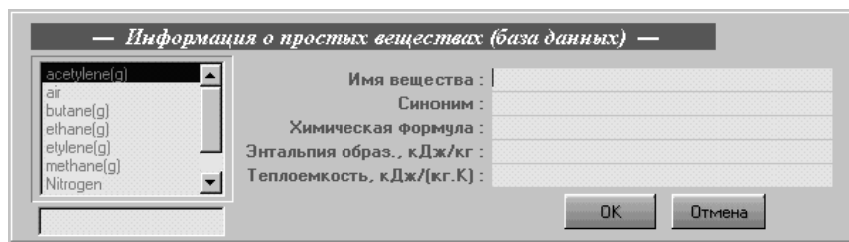


Рис. 10. Вид панели ввода информации о новых простых веществах в базу данных

4. Задание параметров равновесия

Равновесное состояние любой закрытой и изолированной термодинамической системы однозначно определяется значениями двух параметров состояния. Ими могут быть любые два параметра из следующих шести термодинамических величин:

- ✓ давление, МПа;
- ✓ температура, К;
- ✓ удельный объем, м³/кг;
- ✓ энтропия, кДж/(кг К);
- ✓ полная энтальпия, кДж/кг;
- ✓ полная внутренняя энергия, кДж/кг.

За термодинамической величиной через запятую указана единица измерения, в которой должно вноситься в программу её численное значение.

Поименный перебор определяющих термодинамических параметров выполняется путем последовательного нажатия кнопок со стилизованной стрелкой-треугольником на панели — *Параметры равновесия* — (рис. 11).

Для выбранных параметров равновесия в полях ввода должны быть назначены их численные значения в требуемых единицах измерения.

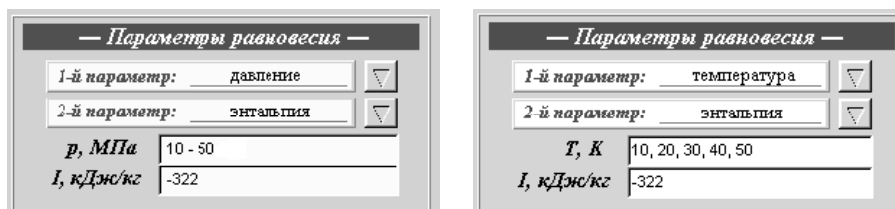


Рис. 11. Вид панели — *Параметры равновесия* —

В качестве численных значений параметров могут быть заданы одиночные величины, тогда расчет состава и свойств системы будет выполнен в одной «точке».

Возможно также задание списка значений или интервала изменения параметра. В случае задания списка значения элементов должны разделяться запятыми. При задании интервала изменения значений параметра между минимальным и максимальным пределом изменения параметра должен быть указан дефис или косая черта, например, 1000-3000

или 1000/3000. Сами значения могут заключаться в скобки, что просто необходимо, если назначаемая величина отрицательна, например, (-320)-(-120).

Если шаг изменения параметра не задан, тогда он автоматически выбирается таким, чтобы все промежуточные величины имели округленные значения, а количество расчетных значений параметра не превышало ста.

При выборе в качестве параметра температуры минимально возможный шаг составляет один градус.

Существует возможность назначить требуемый шаг изменения параметра. Для этого в строке редактирования помимо минимального и максимального значений параметра нужно задать третье число – шаг. Оно должно отделяться от предшествующей информации знаком минус (дефис) или косой чертой. Например, 10-50-2 (или 10-50/2). Такая запись предполагает, что расчет будет проводиться при значениях параметра 10, 12, 14, ..., 50. При выборе очень малого шага цепочка значений параметра будет ограничена ста величинами, начиная от минимального значения параметра.

Интервал изменения может быть назначен как для первого, так и для второго параметра, а также для обоих параметров одновременно. В последнем случае интервал изменения второго параметра автоматически будет разбит на четыре равномерных отрезка (пять точек), независимо от того, задан или не задан шаг. Это делается для удобства последующего представления результатов.

5. Вычисление полной энтальпии (внутренней энергии) системы

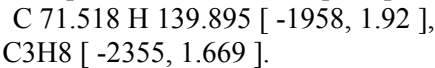
При моделировании состояния, соответствующего завершению адиабатического превращения рабочего тела при постоянном давлении или объеме, в качестве определяющих параметров состояния выступают соответственно:

- 1) полная энтальпия и давление,
- 2) полная внутренняя энергия и удельный объем (плотность).

Полная энтальпия и полная внутренняя энергия являются аддитивными функциями, поэтому они могут быть вычислены как сумма энтальпий или внутренних энергий всех простых веществ, образующих систему.

При стандартной температуре 298,15 К (25°C) полная энтальпия и полная внутренняя энергия простого вещества численно равны его энтальпии образования.

Эти значения могут быть заданы в исходных данных вместе с удельной теплоемкостью непосредственно после химической формулы простого вещества в квадратных скобках, например:



Первое число в квадратных скобках представляет собой энтальпию образования простого вещества в кДж/кг, а второе \square его удельную теплоемкость при стандартной температуре в кДж/(кг К). В общем случае указание этих физико-химических величин является необязательным. Возможно задание только энтальпии образования без указания значения удельной теплоемкости.

Если энтальпия образования задана для всех простых веществ, включенных в состав системы, и в качестве одного из равновесных параметров состояния выбрана энтальпия или внутренняя энергия системы, то это значение вычисляется программным путем и автоматически помещается в поле параметра. Пример такой ситуации приведен на рис. 12.

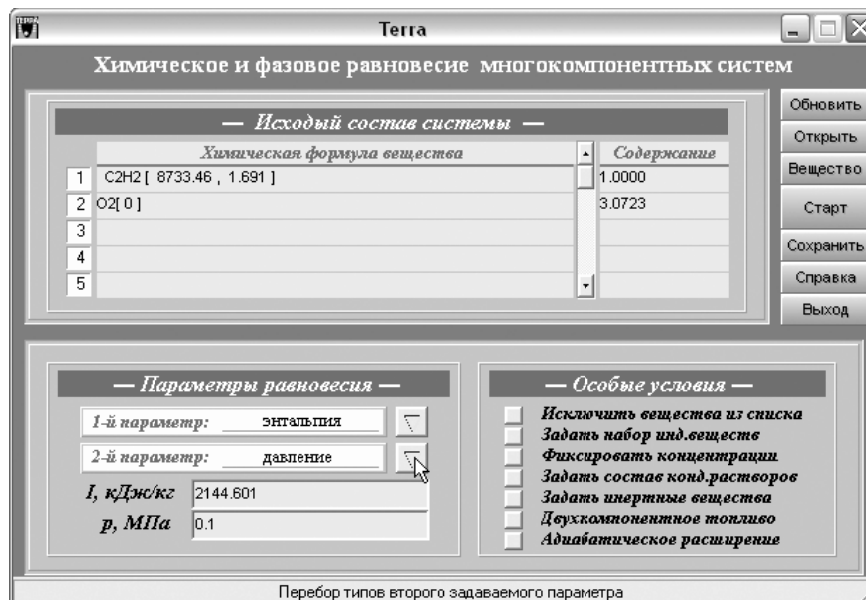


Рис. 12. Окно рабочих элементов программы

Вычисленное таким образом значение энтальпии соответствует начальной температуре всей системы и каждого простого вещества в отдельности 298,15 К, т.е. стандартному значению температуры.

Имеется возможность рассмотреть случай, когда начальная температура одного или нескольких простых веществ T отличается от стандартной температуры. Тогда к энтальпии образования должна быть прибавлена величина $C_p(T - 298,15)$, равная изменению термодинамической энтальпии вещества. Чтобы ввести эту добавку, необходимо сообщить информацию об удельной теплоёмкости при постоянном давлении и о температуре простого вещества.

Удельная теплоемкость заносится в квадратные скобки через запятую после энтальпии образования, как было показано выше, а температура вещества должна задаваться в квадратных скобках после числового значения, определяющего содержание вещества. Температура задается по шкале Кельвина. Пример такого варианта задания исходных данных приведен на рис. 13.

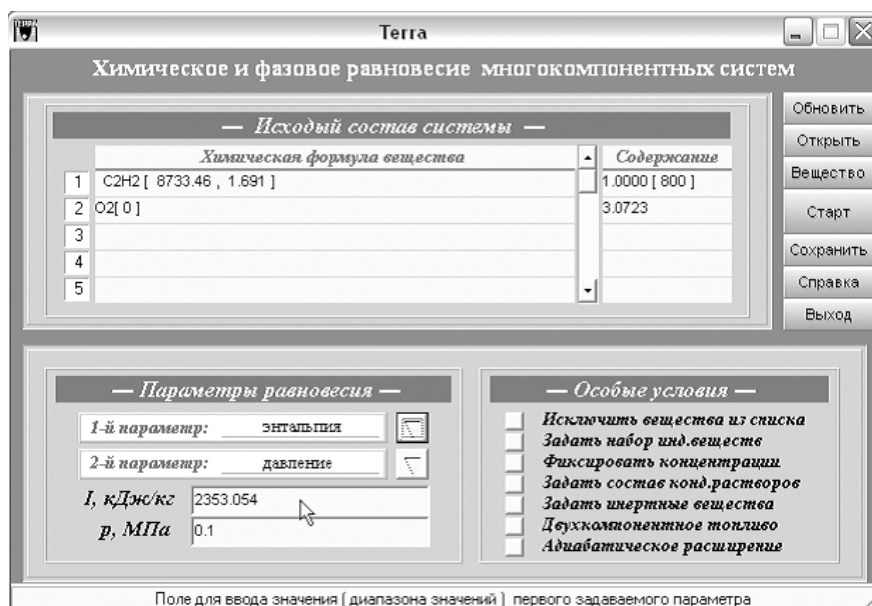


Рис. 13. Вариант задания исходных данных в окне рабочих элементов программы

6. Ограничение списка индивидуальных веществ, рассматриваемых при проведении расчетов

В некоторых случаях у пользователя может возникнуть в ходе моделирования потребность самостоятельно скорректировать тот список индивидуальных веществ, который должен быть принят при проведении расчета данного варианта. Прежде всего, эти вещества должны быть в базе данных СПК TERRA. Для этого предусмотрены два следующих способа:

- поименно исключать из расчёта любые вещества, выбранные из базы данных;
- поименно включать в расчёт требуемые соединения.

Для поименного исключения из расчета любых веществ по желанию пользователя необходимо на панели — *Особые условия* — отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку *Исключить вещества из списка*. В результате слева от панели — *Особые условия* — появится новая панель со списком индивидуальных веществ, выбранных из базы данных для предварительно сформированного списка индивидуальных веществ, которые могли входить в равновесный химический состав системы (рис.14).

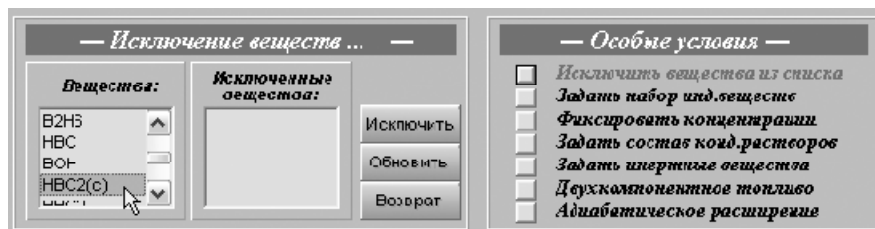


Рис. 14. Вид двух панелей при нажатой кнопке *Исключить вещества из списка*

Необходимо отметить, что кнопка *Исключить вещества из списка* остается неактивной, если не задан химический состав системы.

После появления на экране панели — *Исключение веществ ...* — становится возможным выполнить процедуру выбора исключаемых веществ следующими двумя способами:

1. Мышью по одному перемещают вещества из левого в правое поле, создавая новый список исключаемых веществ.
2. Отмечать исключаемое вещество курсором, а затем нажимать кнопку *Исключить*.

Кнопка **ОБНОВИТЬ** отменяет все ранее выполненные действия по созданию списка исключаемых веществ и восстанавливает исходный список веществ в левом поле панели. Возврат выбранных для исключения веществ может быть также выполнен путем обратного перемещения мышью веществ из поля *Исключенные вещества* в поле *Вещества*, т.е. справа налево.

После завершения всех действий по созданию списка исключаемых веществ необходимо закрыть панель — *Исключение веществ ...* —, нажав кнопку **Возврат** (см. рис.14). В процессе исключения веществ все управляющие клавиши основного окна оставались невидимыми и неактивными. После закрытия панели функции эти клавиши восстанавливаются.

В тех случаях, когда задачей моделирования является изучение частичных равновесий, процедура выбора веществ из списка может оказаться более удобной, чем процедура исключения, описанная выше.

Для поименного включения в расчет любых веществ по желанию пользователя необходимо на панели — *Особые условия* — отметить нажатием левой клавиши мыши кнопку *Задать набор инд. веществ*. В результате, слева от панели — *Особые условия* — появится новая панель со списком тех индивидуальных веществ, которые окажутся выбранными из базы данных для предварительно сформированного химического состава системы (рис. 15).

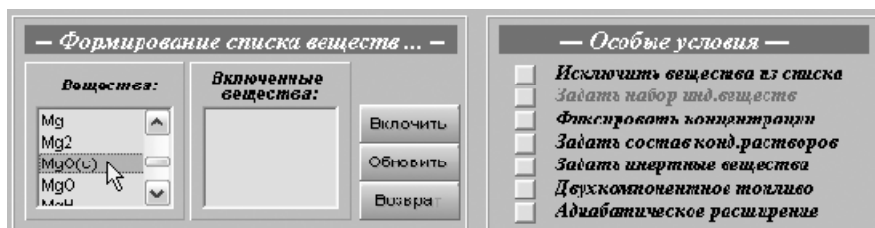


Рис. 15. Вид двух панелей при нажатой кнопке *Задать набор инд. веществ*

Захватывая и перенося мышью вещества из левого в правое поле, формируют последовательно новый список индивидуальных веществ последующего варианта расчёта.

Создание нового списка включенных веществ аналогично созданию списка исключаемых веществ.

7. Учет возможной частичной неравновесности рабочего тела

При моделировании реальных процессов и состояний, имеющих место в ракетных двигателях, могут появиться отклонения рабочего тела (системы) от равновесного состояния. Отличие концентраций ряда индивидуальных веществ от их равновесных значений возможно из-за относительно медленного протекания химических реакций. При этом в остальной части системы наблюдается полное химическое равновесие. Такой расчет рабочего тела может приблизить его результаты к данным экспериментальных исследований и наблюдений.

В программе предусмотрены два следующих варианта задания условий неполного равновесия:

- непосредственное задание концентраций ряда веществ;
- задание содержания «инертной», т.е. не реагирующей, части веществ в конденсированном состоянии.

Для задания фиксированных концентраций веществ необходимо на панели — *Особые условия* — нажать левой клавишей мыши кнопку *Фиксировать концентрации*. В результате слева от панели — *Особые условия* — появится новая панель со списком выбранных из базы данных индивидуальных веществ, для которых можно назначать фиксированные значения концентраций (рис. 16).

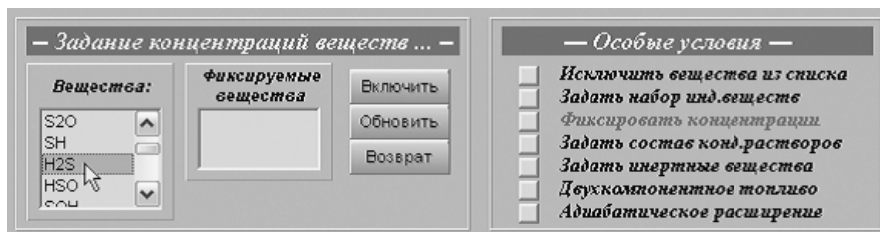


Рис. 16. Вид панелей при нажатой кнопке *Фиксировать концентрации*

Выбрав из списка в левом окне панели интересующее вещество, необходимо переместить его в правое окно либо нажать клавишу **Включить**. Как только интересующее вещество появится в поле *Фиксируемые вещества*, необходимо указать в поле редактирования его содержание в моль/кг и нажать кнопку **Назначить** (рис. 17).

Далее можно либо повторять процедуру задания фиксированных концентраций, либо с помощью кнопки **Возврат** завершить этот этап фор-

мирования исходных данных. Возможные виды панели — *Задание концентрации веществ...* — после завершения этапа формирования исходных данных показаны на рис. 18.

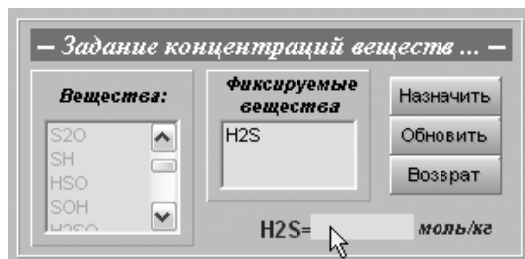


Рис. 17. Вид панели при назначении содержания фиксируемого вещества в системе размерностью моль/кг



Рис. 18. Виды панели при завершении этапа формирования исходных данных

Количество индивидуальных веществ, для которых заранее назначена концентрация, может достигать пятидесяти. Однако следует с осторожностью пользоваться этой функцией программы, т.к. всегда существует опасность задания состояний, не реализуемых с точки зрения законов термодинамики. Формальные ошибки, когда общее содержание какого-либо химического элемента в системе меньше, чем его содержится в фиксируемом веществе, отслеживаются самой программой. В этом случае выводится сообщение, представленное на рис. 19.

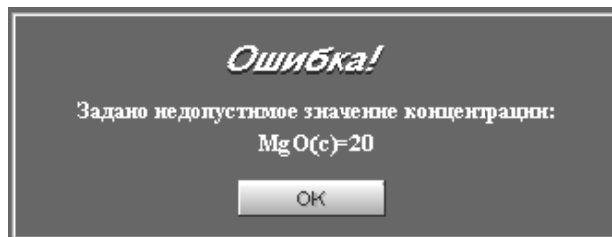


Рис. 19. Вид сообщения СПК TERRA

Задание содержания инертных, т.е. не вступающих в химическое взаимодействие, компонентов возможно для индивидуальных веществ в конденсированном состоянии. Такая ситуация возникает при моделировании процессов горения, если обнаруживается, что часть исходных индивидуальных веществ остается не сгоревшей, т.е. не вступившей в окислительно-восстановительную реакцию.

Для задания доли инертных веществ необходимо на панели — *Особые условия* — левой клавишей мыши нажать кнопку *Задать инертные вещества*. Слева от панели — *Особые условия* — появится новая панель — *Выбор инертных веществ...* — с полем базы данных конденсированных индивидуальных веществ, для которых можно назначать инертные компоненты (рис. 20).

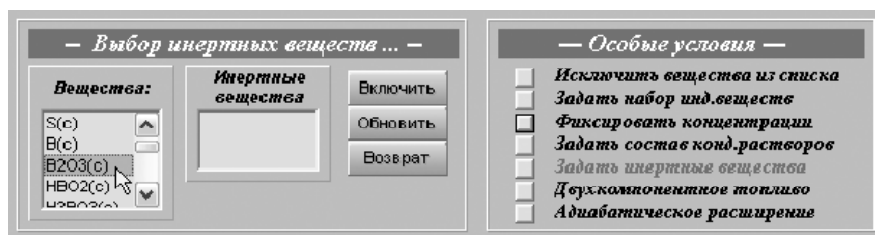


Рис. 20. Вид двух панелей после нажатия кнопки *Задать инертные вещества*

Процедура назначения содержания инертных веществ подобна описанной выше процедуре назначения фиксированных концентраций. Отличие состоит в том, что инертные вещества дополнительно включаются в список ожидаемых компонентов и могут быть идентифицированы с помощью индекса (i), добавляемого к химической формуле, например $MgO(i)$, $B_2O_3(i)$ (рис. 21).

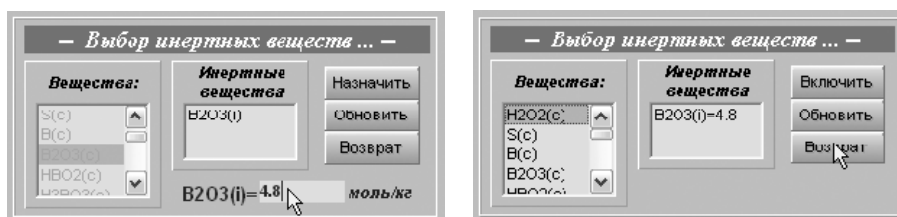


Рис. 21. Виды панели при идентификации инертных веществ

8. Расчет параметров равновесных состояний систем с использованием модели конденсированных растворов

В СПК TERRA для задания состава и свойств растворов имеется дополнительная опция. Она вызывается нажатием на панели — *Особые условия* — кнопки *Задать состав конд. растворов* (рис.22). После включения в исходные данные сведений о конденсированных растворах эта строка изменяет цвет с чёрного на бирюзовый.

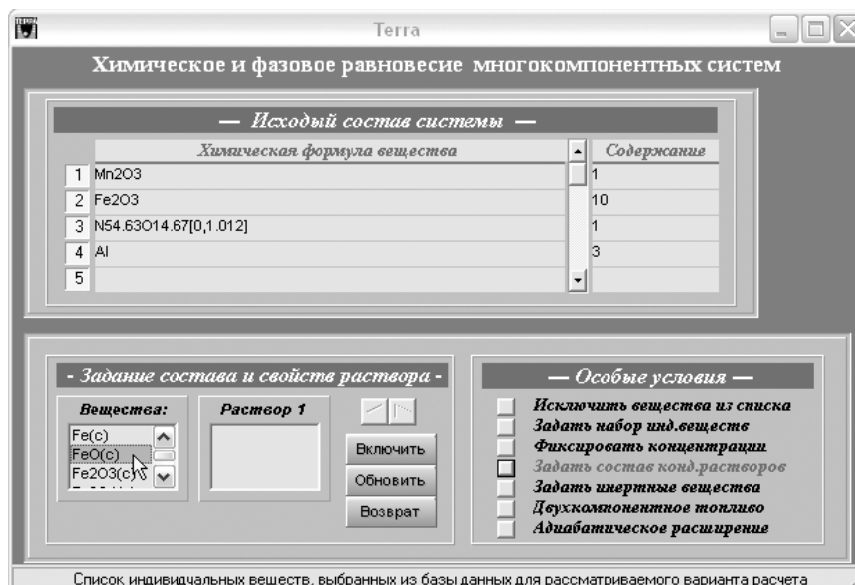


Рис. 22. Основное окно при нажатии кнопки *Задать состав конд. растворов*

Возможность назначения конденсированных растворов не уменьшает прежних функциональных возможностей СПК. Пока не назначен список веществ ожидаемых конденсированных растворов и не определены парциальные избыточные энтальпии их компонентов, в специализированном программном комплексе все индивидуальные вещества в конденсированном состоянии полагаются однокомпонентными несмешивающимися фазами.

Нажатие кнопки *Задать состав конд. растворов* приводит к изменению левой нижней части основного окна программы. На месте панели — *Параметры равновесия* — появляется новая панель — *Задание состава и свойств раствора* —. Эта панель показана на рис. 23.

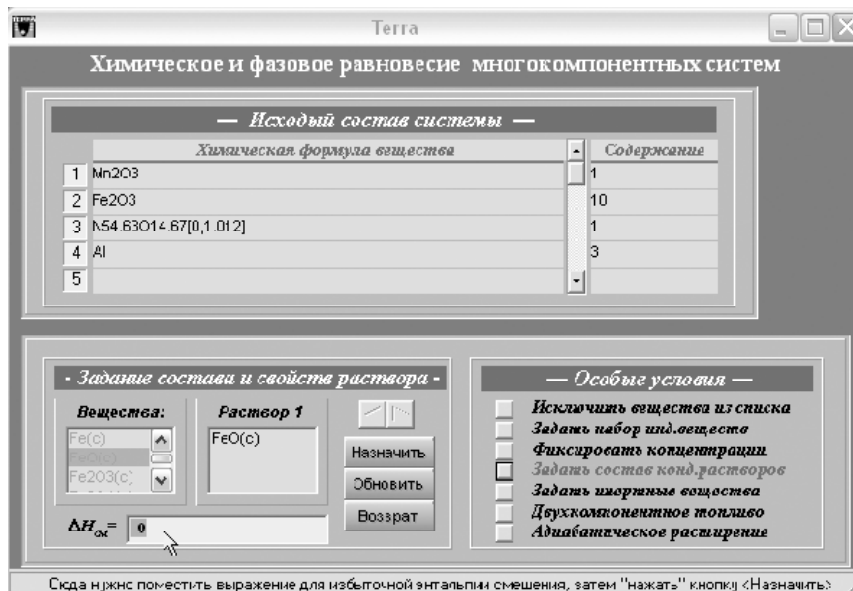


Рис. 23. Вид панели - *Задание состава и свойств раствора* -

На панели — *Задание состава и свойств раствора* — в поле *Вещества* размещается автоматически формируемый список конденсированных веществ, образованных из химических элементов, входящих в состав исследуемой системы.

Содержание поля *Раствор №* формируется пользователем, который включает в него те индивидуальные вещества, которые по его представлениям должны входить в состав раствора. Включение выбранного вещества в рабочее тело осуществляется либо путем нажатия на кнопку **Включить**, либо перетаскиванием имени вещества из левой в правую таблицу.

Немедленно после появления формулы индивидуального вещества в поле *Раствор №* на панели — *Задания состава и свойств раствора* — появляется поле редактирования, в котором требуется задать парциальную избыточную энтальпию смешения этого индивидуального вещества (см. рис.23). При этом кнопка **Включить** заменяется кнопкой **Назначить**.

В поле редактирования можно набрать арифметическое выражение, которое в программе будет использовано для вычисления избыточной

энтальпии смешения компонента $\Delta H_{см}$. В частном случае это может быть числовая константа. Если задать нулевое значение, то это будет предполагать модель идеального раствора.

Для моделирования с использованием более сложных моделей конденсированных растворов (строгорегулярные, квазирегулярные, субрегулярные и другие) в качестве $\Delta H_{см}$ может назначаться выражение, зависящее от мольной доли компонента в растворе и температуры (рис.24).

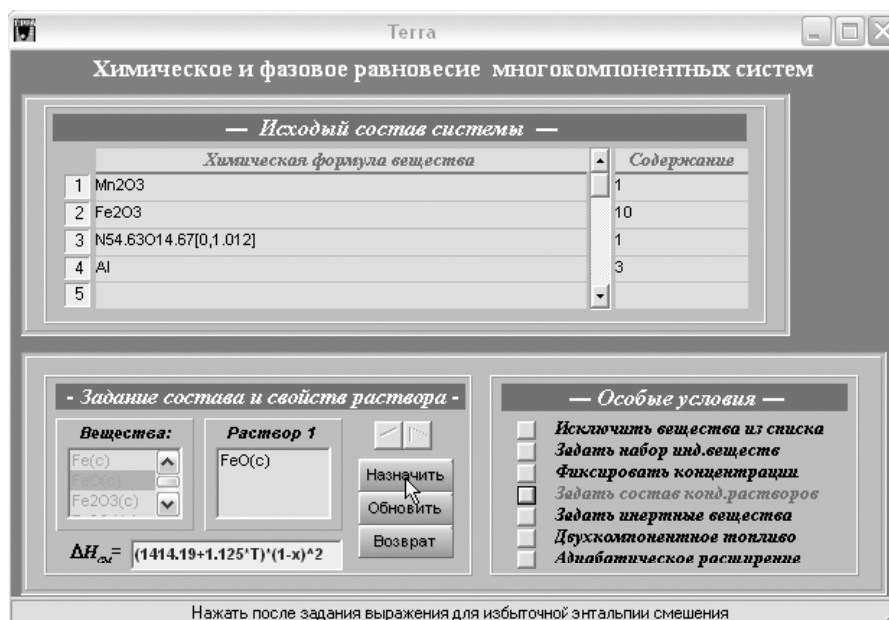


Рис. 24. Пример ввода арифметического выражения для подсчёта $\Delta H_{см}$

Вводимое алгебраическое выражение может содержать числовые константы, у которых целая часть отделяется от дробной точкой; знаки арифметических операций +, -, *, /, ^; круглые скобки и основные математические функции sin, cos, ln, lg, exp, abs, sqrt. Аргумент функции должен быть заключен в круглые скобки. Вычисляемая избыточная энтальпия должна иметь размерность Дж/моль. В арифметическое выражение могут быть включены температура (Т) и мольная доля компонента раствора (х), например $(1414.19+1.125 \cdot T)^{(1-x)^2}$.

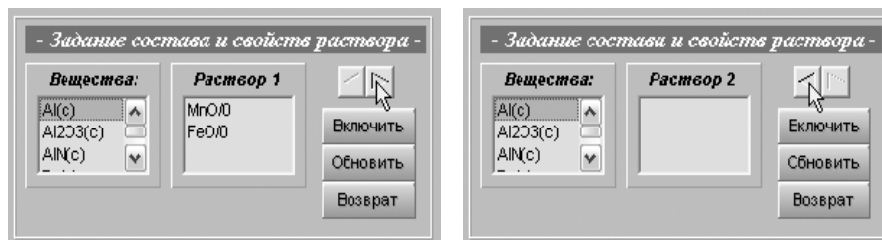


Рис. 25. Вид панели при формировании исходных данных для следующего раствора

После формирования состава и свойств первого раствора появляется возможность перейти к заданию параметров следующего раствора. Для этого необходимо нажать кнопку со стрелкой в правом верхнем углу панели — *Задание состава и свойств раствора* — и продолжить процесс формирования исходных данных для следующего раствора 2 (рис. 25).

Закончив задание составов и свойств требуемых растворов, следует осуществить возврат к режиму ввода условий равновесия и запуска программы на выполнение.

После завершения расчета в списках равновесных концентраций компоненты конденсированных растворов отмечаются символами (s1), (s2) и т.д., где цифра – номер раствора. В качестве примера на рис. 26 показан образец вывода состава после завершения расчета с использованием модели конденсированных растворов.

Компонент	моль/кг
Al2O	0
Al2O3(c)	3.7062
Al2O3	0
AlN(c)	0
AlN	0
Fe(s2)	5.5513
Fe	$0.2849 \cdot 10^{-6}$
FeO(s1)	2.7822
FeO	$0.9215 \cdot 10^{-10}$
FeO2	$0.1225 \cdot 10^{-13}$
Fe2O3(s1)	0.00798
Fe3O4(c)	0

Т = 1500, К
 p = 0.1 МПа
 Единицы: моль/кг
 Печать Сохранить

Рис. 26. Вид панели вывода состава после расчета конденсированных растворов

9. Задание содержания химических элементов в двухкомпонентных ракетных топливах

Одной из распространенных задач, решаемых на основе применения модели термодинамического равновесия, является изучение фазовых и химических превращений продуктов сгорания двухкомпонентных топлив при разном соотношении компонентов, изменяющемся в широком интервале значений.

Двухкомпонентное топливо, состоящее из окислителя и горючего, является наиболее распространённым видом жидкого ракетного топлива.

К окислителям относятся вещества, содержащие в своём составе преимущественно окислительные элементы, т.е. элементы с электроотрицательной валентностью, а горючим – вещества, содержащие в своём составе преимущественно горючие элементы, т.е. элементы с электроположительной валентностью. Поэтому сумма валентностей для окислителей будет отрицательна, а горючих – положительна.

В отдельных случаях окислитель и горючее сами по себе могут представлять смеси или растворы простых веществ. Тогда задача определения стехиометрического соотношения компонентов и расчета мольного содержания химических элементов в условной химической формуле топлива становится весьма трудоёмкой.

Для решения этой первоочередной подготовительной задачи на панели — *Особые условия* — необходимо левой клавишей мыши нажать кнопку *Двухкомпонентное топливо*. В результате слева от панели — *Особые условия* — появится новая панель с полями для размещения простых веществ, входящих в состав горючего и окислителя. Вид окна с панелями для размещения простых веществ, входящих в состав горючего и окислителя, показан на рис. 27.

На основании информации, извлекаемой из панели — *Исходный состав системы* —, для всех заданных простых веществ вычисляется алгебраическая сумма валентностей химических элементов, что дает возможность сразу разделить вещества на две группы – горючие и окислители и вычислить для них массовое стехиометрическое соотношение компонентов K_m^o , обозначенное на панели $k(o)$.

Если в исходном составе топлива всего два вещества, то их содержание в панели — *Исходный состав системы* — может вообще не задаваться.

Когда окислитель и (или) горючее состоят из нескольких веществ, требуется задать соотношение между ними. На рис. 27 кислород (O_2) и воздух ($N_{54.63}O_{14.67}$), образующие окислитель, взяты в соотношении 4 : 0.5, а метан (CH_4) и пропан (C_3H_8) в соотношении 0.5 : 0.5.

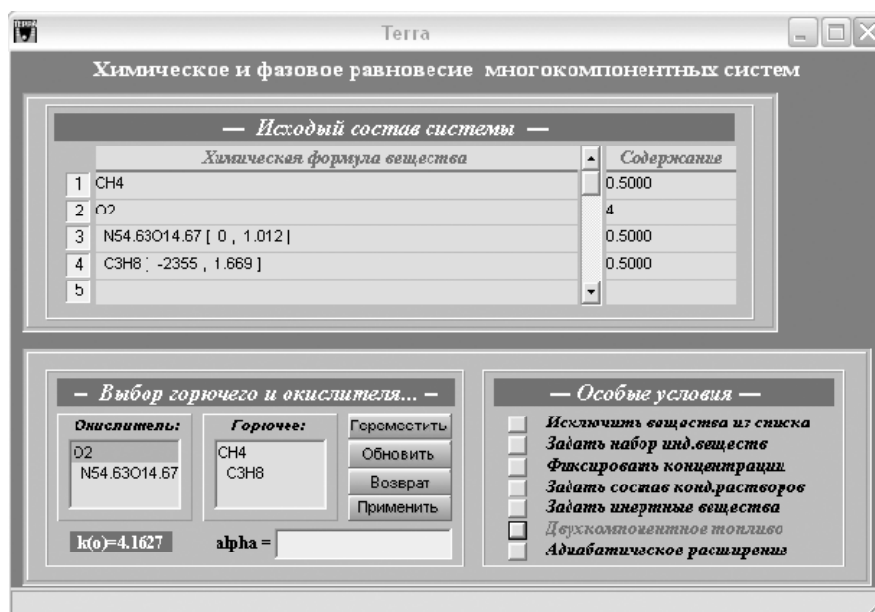


Рис. 27. Вид окна с панелями для размещения простых веществ, входящих в состав горючего и окислителя

Если информация об относительном содержании веществ в составном горючем или окислителе будет отсутствовать, то программа выдает соответствующее оповещение.

Простые вещества могут быть перемещены из поля горючего в поле окислителя и наоборот с помощью мыши или кнопки **Переместить**. Если в процессе перемещения «вручную» композиция потеряет свойства двухкомпонентного топлива, т.е. сумма валентностей окислителя станет положительной или сумма валентностей горючего – отрицательной, то на панели *Выбор горючего и окислителя...* перестанут отображаться значение стехиометрического соотношения компонентов $k(o)$ и поле для ввода численного значения коэффициента избытка окислителя (рис. 28).

Нажатие на кнопку **Возврат** приводит к восстановлению исходного содержимого панели *Параметры равновесия*.

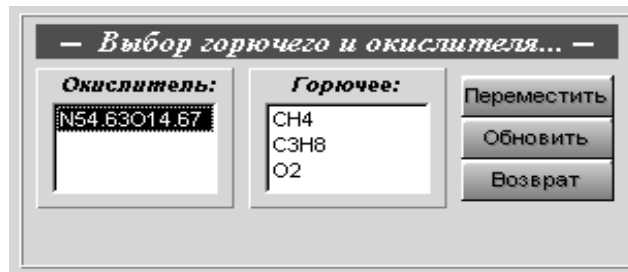


Рис. 28. Вид панели — *Выбор горючего и окислителя...* — с полями горючего и окислителя

Если значение стехиометрического соотношения отображается на панели — *Выбор горючего и окислителя...* — (см. рис. 27), то могут быть заданы одиночное значение коэффициента избытка окислителя, ряд значений, разделенных запятыми, или интервал значений. Например: 1.1 или 1.0,1.1,1.2,1.3, или 1.0–1.3, или 1.0–1.3–0.1.

После нажатия на клавишу «Возврат» значения содержания простых веществ на панели — *Параметры равновесия* — изменяются после пересчета в соответствии с назначенными значениями коэффициента избытка окислителя (рис. 29).

10. Расчет параметров изоэнтروпийного расширения продуктов сгорания в сопле

В СПК TERRA предусмотрена специальная возможность задания исходных данных и вычисления термодинамических и теплофизических свойств продуктов сгорания заданного ракетного топлива при одномерном изоэнтропийном расширении их в сопле, а также идеальных параметров ракетного двигателя. Для её реализации следует нажать кнопку *Адиабатическое расширение* на панели — *Исходный состав системы* —. Панель — *Параметры равновесия* — будет заменена при этом на новую панель — *Параметры камеры и сопла* — (рис. 30).

При расчете изоэнтропийного расширения рабочего тела в сопле одним из задаваемых параметров равновесия всегда является давление в камере сгорания или газогенераторе p_k , обозначаемое в СПК $p(кам)$. Оно задаётся в МПа. Вторым параметром, характеризующим данное сечение сопла, может быть выбран любой из следующих пяти параметров рабочего тела (продуктов сгорания):

- ✓ статическая температура T в К;

- ✓ удельный объём ν в м³/кг;
- ✓ удельная энтропия S в кДж/кг К;
- ✓ удельная энтальпия I в кДж/кг;
- ✓ удельная внутренняя энергия U в кДж/кг.

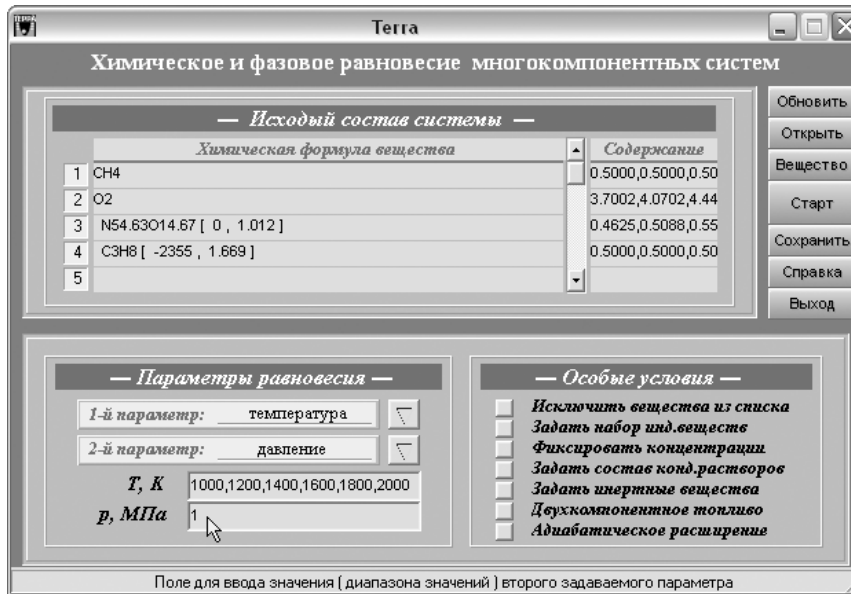


Рис. 29. Состояние окна совокупности рабочих элементов программы

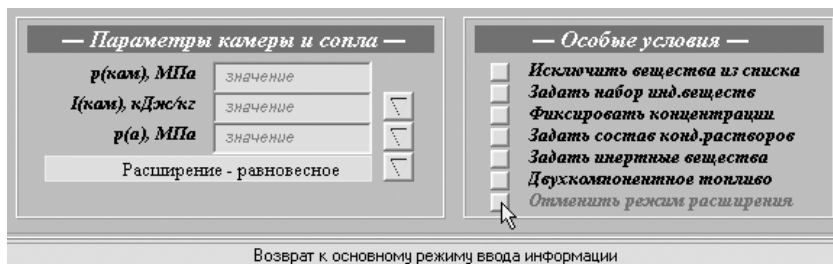


Рис. 30. Вид панели — Параметры камеры и сопла —

Чаще всего при решении подобных задач выбираются удельная энтальпия I или статическая температура рабочего тела T .

Условие расширения рабочего тела в сопле РД может быть задано одним из следующих четырёх параметров:

- 1) статическим давлением на срезе сопла p_a , обозначаемым в СПК $p(a)$;
- 2) степенью расширения РТ в сопле $\varepsilon = p_{\kappa}/p_a$, обозначаемой в программе $p(\text{кам})/p(a)$;
- 3) относительным диаметром выходного сечения сопла $\bar{d}_a = d_a/d_m = d_a/d_*$, обозначаемым в СПК $d(a)/d(\text{кр})$;
- 4) геометрической степенью расширения сопла $\bar{F}_a = F_a/F_m = F_a/F_*$, обозначаемой в СПК $S(a)/S(\text{кр})$.

Кнопкой перебора, расположенной справа от третьего сверху поля редактирования (см. рис. 30), выбирается требуемый параметр, определяющий условие расширения рабочего тела, и заносится в поле его требуемое численное значение в указанных единицах измерения.

Условием расширения, записываемым в третьем сверху поле панели — *Параметры камеры и сопла* — (см. рис. 30), может быть задано одно единственное значение или ряд значений, разделенных запятыми, или интервал значений через дефис.

Параметры рабочего тела в критическом сечении сопла рассчитываются всегда.

Задаваемый параметр равновесия в камере сгорания во втором сверху поле редактирования панели — *Параметры камеры и сопла* — (см. рис. 30) также может содержать несколько значений, но не более пяти.

Внимание! Вариации по составу рабочего тела, т.е. коэффициенту избытка окислителя, в этом случае не предусмотрены.

СПК TERRA позволяет проводить расчеты по любой из трех моделей расширения РТ:

- 1) равновесное,
- 2) равновесное до критического сечения и замороженное после него,
- 3) замороженное расширение от сечения с заданной температурой.

Необходимый режим выбирается путем последовательного нажатия на кнопку с изображением стилизованной стрелки в нижней части панели — *Параметры камеры и сопла* —. При выборе модели замороженного расширения от сечения с заданной температурой на панели дополнительно отображается поле редактирования для ввода значения температуры ступенчатого замораживания состава продуктов сгорания $T_{(\text{зам})}$ в К (рис. 31).

— Параметры камеры и сопла —

$p(\text{кам}), \text{МПа}$	1	
$T(\text{кам}), \text{К}$	3500,3600	▼
$S(a) / S(\text{кр})$	1,5,5,10,20	▼
Расширение - равновесное до $T(\text{зам})$		☐
$T(\text{зам}), \text{К}$	1500	

Рис. 31. Вид панели — *Параметры камеры и сопла* —

Расчёт требуемого процесса изэнтропийного расширения продуктов сгорания в сопле позволяет получить их равновесный состав, значения следующих термодинамических и теплофизических свойств РТ и идеальных параметров ракетного двигателя:

- средний показатель изэнтропы расширения рабочего тела n , представляющего собой продукты сгорания рассматриваемого двухкомпонентного ракетного топлива,
- скорость истечения продуктов сгорания из сопла W ,
- число Маха M ,
- относительная площадь сопла \bar{F} ,
- удельная площадь рассматриваемого сечения сопла f ,
- идеальный удельный импульс тяги в пустоте $I_{y.n.ид}$,
- идеальный расходный комплекс $\beta_{ид}$ ($\beta_{ид} = C_{*ид}$).

Эти характеристики выводятся на экран, отображаются в виде графиков, сохраняются в виде файлов и выводятся на печать вместе с остальными параметрами равновесных состояний. На рис. 32 показан вид панели — *Параметры камеры и сопла* —.

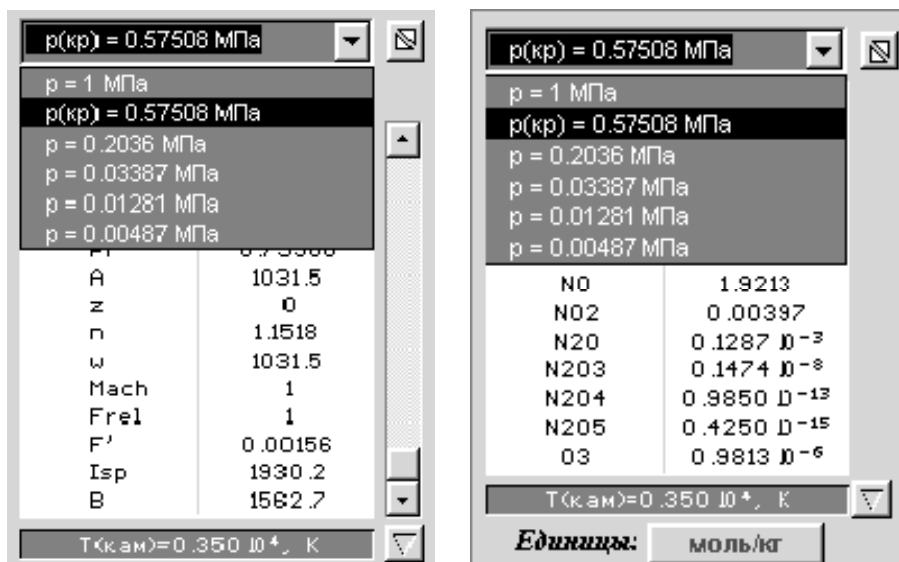


Рис. 32. Вид панели — *Параметры камеры и сопла* —

11. Сохранение исходных данных варианта в файле

Подготовленные исходные данные любого варианта расчёта могут быть сохранены на диске для последующего их восстановления. Чтобы записать исходные данные варианта в файл, необходимо нажать управляющую кнопку **Сохранить**. В результате поверх основного окна программы появится стандартная форма, принятая в операционной системе WINDOWS (рис. 33).

Файлы исходных данных по умолчанию имеют расширение .eqf (equilibrium). Это расширение при назначении имени сохраняемого файла можно не указывать, оно будет автоматически присоединено к набранной комбинации символов. Сохранение файла с исходными данными возможно в любом доступном каталоге. Сохранение информации в уже существующем файле приведет к потере предыдущего содержимого.

После выбора имени диска и каталога, а также после назначения имени файла должна быть нажата кнопка **Сохранить**, чтобы исходные данные были отправлены на длительное хранение.

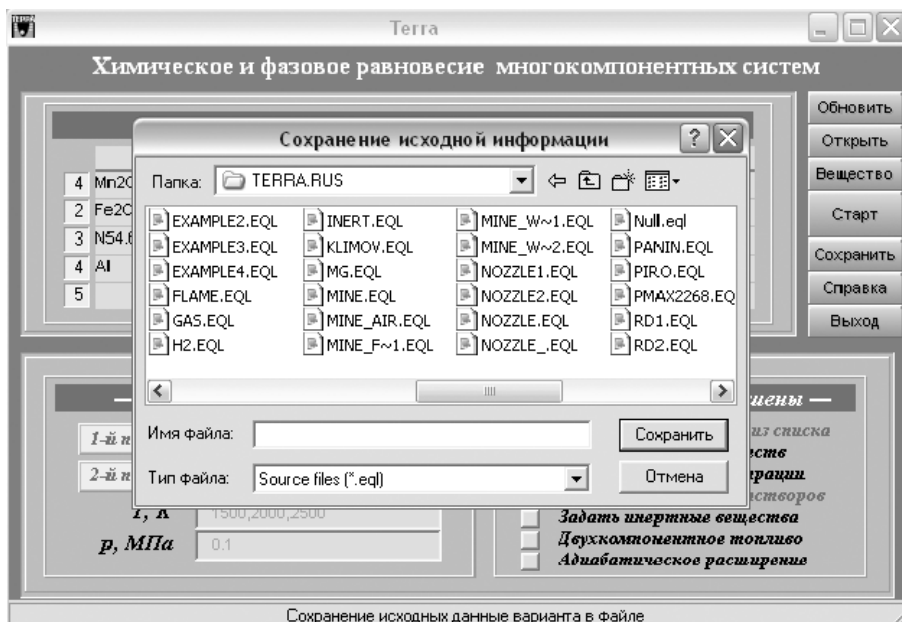


Рис. 33. Вид окна сохранения исходной информации поверх основного окна

Для отмены записи должна быть нажата кнопка **Отмена**.

Создаваемый файл с исходными данными является обычным текстовым файлом, который можно читать и редактировать с помощью любых текстовых процессоров (MSWord, WordPad, Блокнот и др.). Пример содержания такого файла приведён на рис. 34.

Двоеточие отделяет ключевые слова от содержательной информации. Пробелы не являются смысловыми символами. Ниже дается пояснение, какой смысл имеет каждое из зарезервированных ключевых слов.

Ion – состояние выключателя, определяющего необходимость исключения из расчёта ионизированных веществ; параметр может принимать значения **yes** или **no**.

Cond – состояние выключателя, определяющего необходимость исключения из расчёта конденсированных веществ; параметр может принимать значения **yes** или **no**.

Exhaust – переключатель, принимающий значение **no**, если не предусмотрен расчёт параметров расширения в сопле, и **yes** – в противном случае.

```
Ion: no
Cond: yes
Exhaust: no
Subst1: C1 - 20.231
Subst2: H1 - 1.974
Subst3: S1 - 2.632
Subst4: Na - 0.1166
Subst5: Cl - 0.0716
Subst6: N1 - 2.982
Subst7: Cu - 0.133
Subst8: O1 - 18.856
Subst9: H2O1 - 23.795
Subst10: Mg30.35Al8.99C0.72H1.15K0.098N0.098O
0.3 - 16.66
Subst11: N53.918O14.486Ar0.32242C0.0109 - 460
Subst12: Si1 - 12.55
Par1: T= 1800,1500,1200,900 K
Par2: p= 0.1 МПа
```

Рис.34. Пример текстового файла с исходными данными

Subst## – содержимое строки **##**, которая задает формулу простого вещества, входящего в состав рабочего тела, и его массовое количество; параметр в точности повторяет содержимое полей редактирования в панели — *Исходный состав системы* —; дефис разделяет химическую формулу и массовое содержание; количество параметров такого вида может достигать 50, по числу возможных строк редактирования.

Par1 – наименование и интервал изменения первого параметра, как они определены в исходных данных; допустимые наименования параметра следующие: $p =$, $T =$, $v =$, $S =$, $I =$, $U =$.

Par2 – наименование и интервал изменения второго параметра.

Del# – список веществ, исключаемых из рассмотрения при проведении расчёта; **#** – порядковый номер строки в исходных данных, поскольку список исключаемых веществ может быть достаточно представительным.

Inc# – список индивидуальных веществ, отобранных для рассмотрения при проведении расчёта; **#** – порядковый номер строки в исходных данных, поскольку список включаемых веществ может быть достаточно представительным.

Fix# – список индивидуальных веществ, концентрация которых зафиксирована, и заданное значение концентрации; # – порядковый номер строчки в исходных данных.

Inert# – список индивидуальных веществ, назначенных как инертные, и соответствующие им значения; # – порядковый номер строчки в исходных данных.

P1cam – наименование (давление) и значение первого параметра, определяющего условия в камере для расчёта процесса расширения рабочего тела в сопле при Exhaust = yes.

P2cam – наименование и интервал изменения второго параметра, определяющего условия в камере (для расчета параметров расширения в сопле при Exhaust = yes); допустимые наименования параметра следующие: $T =$, $v =$, $S =$, $I =$, $U =$.

Ausg – условия расширения $p(a)$, $p(кам)/p(a)$, $d(a)/d(кр)$, $S(a)/S(кр)$ и принятые значения этих параметров.

Model – обозначение модели расширения (равн., замороз., равн. до $T(зам)$).

Sol# – строки с именем и выражением для избыточной энтальпии смешения конденсированных индивидуальных веществ, включаемых в раствор; # – порядковый номер конденсированного раствора.

12. Открытие файла с исходными данными

Для открытия ранее подготовленных и сохраненных файлов с исходными данными одного или нескольких вариантов расчёта необходимо нажать кнопку Открыть. В ответ поверх основного окна разместится стандартное окно WINDOWS Открытие файла с исходной информацией (рис. 35). В поле этого окна будут отображены имена всех файлов с расширением .eq1 из каталога с файлами СПК TERRA. Следует выбрать из списка нужный файл или найти его в другом каталоге или на другом диске.

Данные из выбранного файла будут актуализированы во всех полях и элементах редактирования. Они могут быть использованы для проведения расчетов без изменения или подвергнуты дополнительной правке.

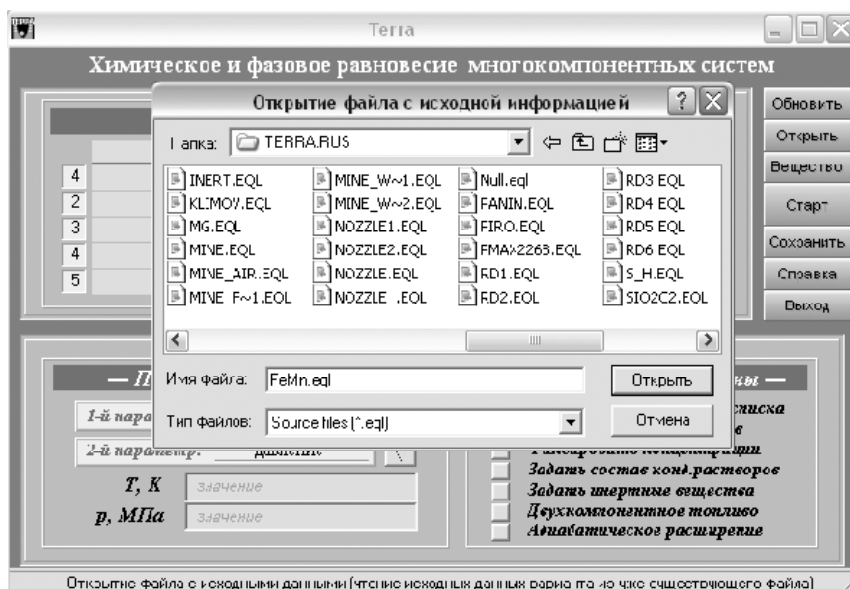


Рис. 35. Стандартное окно WINDOWS «Открытие файла с исходной информацией» на основном окне СПК TERRA

13. Запуск программы на выполнение

После завершения подготовки исходных данных и их запоминания может быть осуществлен запуск программы на выполнение. Для этого достаточно нажать кнопку **Старт** (см. рис. 29). Ход вычислительного процесса отображается в правом нижнем углу основного окна на панели — *Выполнение расчёта* — путем заполнения светлого прямоугольника стилизованными темными блоками (рис. 36).

В любой момент процесс вычислений можно прекратить, нажав кнопку **Прервать**. В результате этого действия основное окно программы принимает исходный вид с данными введенного варианта.

После завершения вычислений во всех расчетных точках панель — *Выполняется расчет* — заменяется на панель — *Вычисления завершены* —. На этой панели имеются две кнопки **Изменить данные** и **Результаты** (рис. 37).

Первая из них позволяет вернуться на шаг назад и продолжить редактирование исходных данных либо перейти к формированию нового задания на расчет.

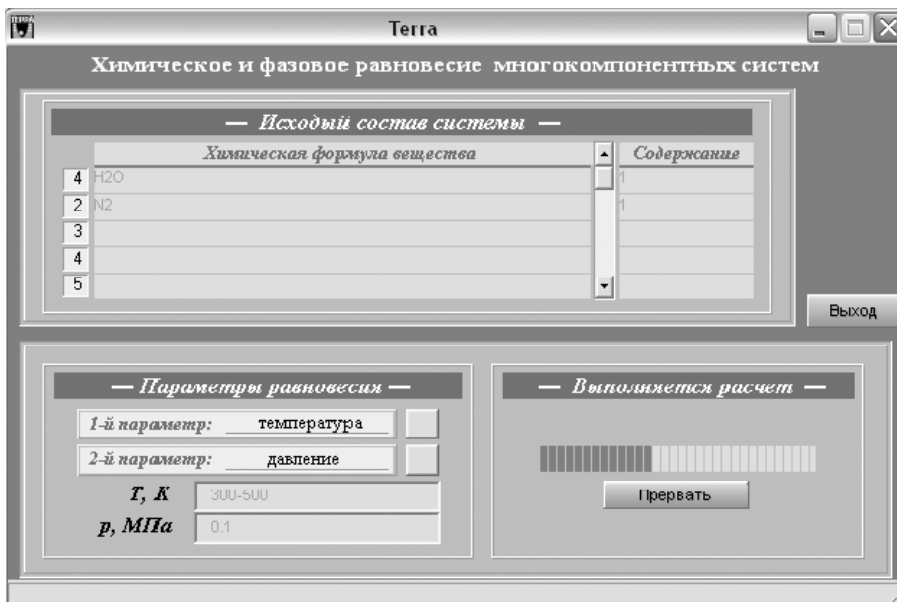


Рис. 36. Отображение процесса выполнения вычислений на основном окне

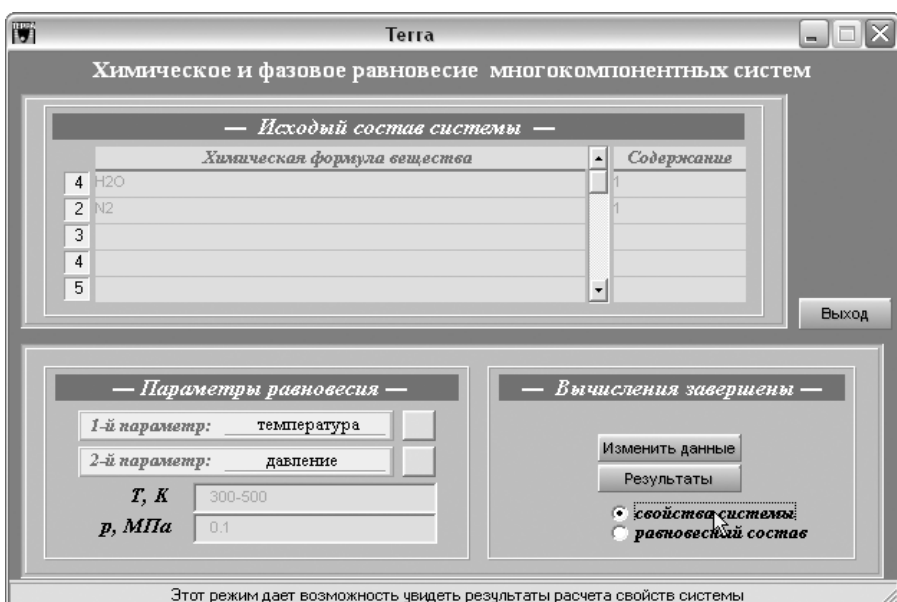


Рис. 37. Вид основного окна после завершения всех вычислений

Кнопка **Результаты** дает возможность увидеть рассчитанные параметры рабочего тела, его состав, концентрации компонентов и их фаз. Из-за большого их объема не удается отобразить все результаты расчета в одной выходной форме. Поэтому пользователю предлагается выбрать, что он хочет просмотреть в первую очередь: термодинамические, теплофизические свойства продуктов сгорания и идеальные параметры ракетного двигателя или равновесный химический и фазовый состав продуктов сгорания.

14. Представление равновесного состава, термодинамических и теплофизических свойств продуктов сгорания и идеальных параметров двигателя

Нажатие кнопки-переключателя *свойства системы* и кнопки **Результаты** на панели — *Вычисления завершены* — (см. рис. 37) приводит к возникновению на экране дочернего окна **Результаты вычислений (свойства)**, показанного на рис. 38.

Левая панель окна **Результаты вычислений (свойства)** предназначена для представления результатов расчетов в графической форме, а правая — в табличной форме.

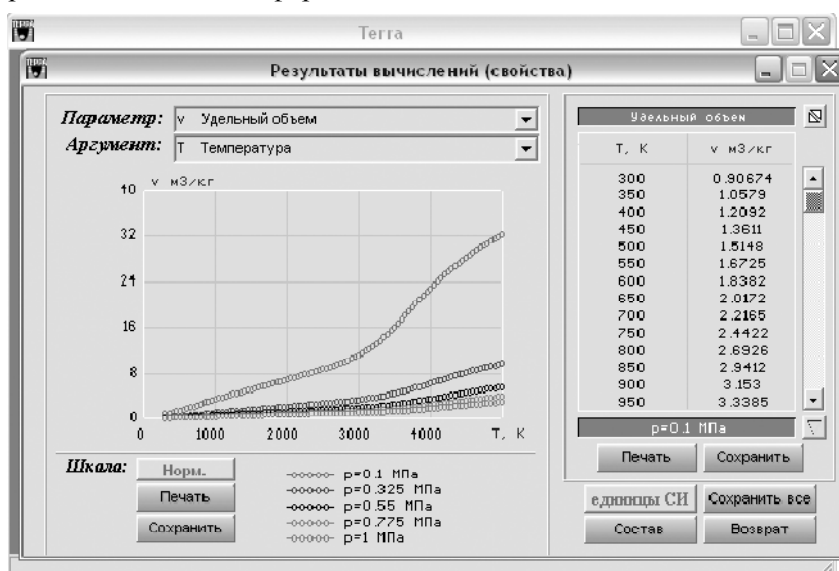


Рис. 38. Вид дочернего окна с результатами вычислений

Аргументом в начальный момент создания окна выбирается тот параметр рабочего тела, который в исходных данных задан интервалом изменения.

Если же интервал задан для обоих параметров равновесия, то строится серия кривых, относящихся к пяти значениям второго параметра.

Первоначально функцией назначается удельный объем.

Расположенные в верхней части левого окна два поля выбора функции и аргумента (независимой переменной) позволяют строить произвольные зависимости из любых 28 заранее вычисленных параметров рабочего тела. На рис. 39 показан пример такого выбора.

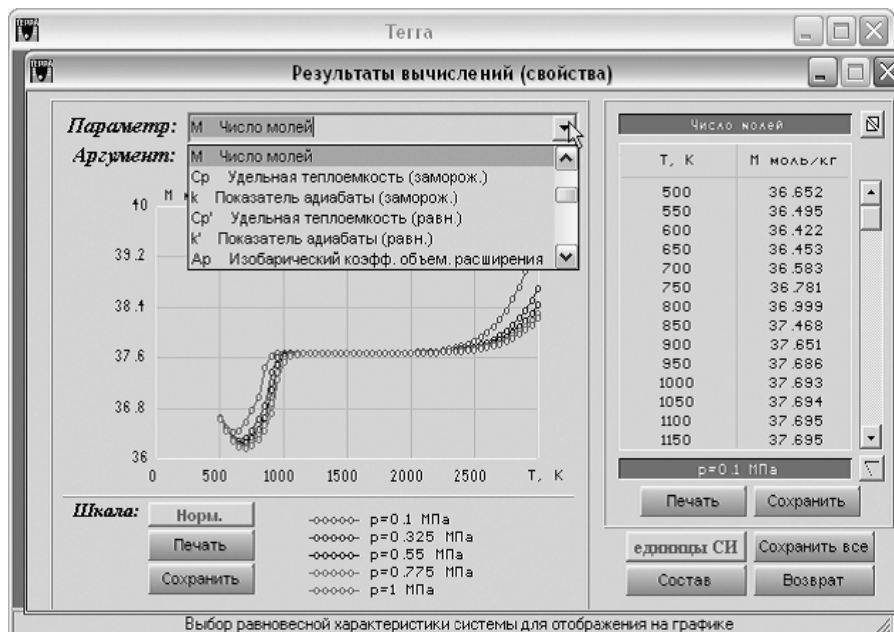


Рис. 39. Вид дочернего окна с результатами вычислений

В результате расчёта равновесного состава, термодинамических и теплофизических свойств продуктов сгорания различных ракетных топлив с помощью СПК TERRA определяются численные значения следующих параметров продуктов сгорания и идеальных параметров ракетного двигателя, которые приведены с их условными обозначениями и размерностями в табл. 1.

Таблица 1. Условные обозначения и размерности вычисляемых параметров

Имя	Название параметра	СИ	Техн.сист.
p	Давление	МПа	атм
T	Температура	К	°С
v	Удельный объем	м ³ /кг	м ³ /кг
S	Энтропия	кДж/(кг К)	ккал/(кг К)
I	Полная энтальпия	кДж/кг	ккал/кг
U	Полная внутренняя энергия	кДж/кг	ккал/кг
M	Число молей	моль/кг	моль/кг
Ср	Удельная теплоемкость (замороженная)	кДж/(кг К)	ккал/(кг К)
k	Показатель адиабаты (замороженный)	1	1
Ср'	Удельная теплоемкость (равновесная)	кДж/(кг К)	ккал/(кг К)
k'	Показатель адиабаты (равновесный)	1	1
Ар	Изобарический коэффициент объемного расширения	1	1
Вv	Изохорический термический коэффициент давления	1	1
Gt	Изотермическая сжимаемость	1	1
ММg	Молярная масса газовой фазы	г/моль	г/моль
Rg	Газовая постоянная	Дж/(кг К)	кал/(кг К)
Срг	Теплоемкость газовой фазы (замороженная)	кДж/(кг К)	ккал/(кг К)
kg	Показатель адиабаты газовой фазы (замороженный)	1	1
Ср'g	Теплоемкость газовой фазы (равновесная)	кДж/(кг К)	ккал/(кг К)
k'g	Показатель адиабаты газовой фазы (равновесный)	1	1
Му	Динамическая вязкость	Па с	кг с/м ²
Lt	Коэффициент теплопроводности	Вт/(м К)	кал/(см с К)

Имя	Название параметра	СИ	Техн.сист.
Lt'	Полный коэффициент теплопроводности	Вт/(м К)	кал/(см с К)
Pr	Число Прандтля (замороженное)	1	1
Pr'	Число Прандтля (равновесное)	1	1
A	Скорость звука	м/с	м/с
n	Показатель процесса расширения	1	1
w	Скорость истечения	м/с	м/с
Mach	Число Маха	1	1
Frel	Относительная площадь сопла	1	1
F'	Удельная площадь сопла	м ² с/кг	м ² с/кг
Isp	Удельный импульс тяги в пустоте	м/с	с
B	Расходный комплекс	м/с	с
z	Массовая доля конденсированных фаз	1	1

Дополнительно в СПК предусмотрена возможность задания произвольной определяемой пользователем зависимости (функции). В списке параметров эта возможность указана последней строчкой **Выражение, задаваемое пользователем**. Выбор этой возможности приводит к появлению строки редактирования, где может быть задана произвольная функция в виде <имя> = <выражение> (рис. 40).

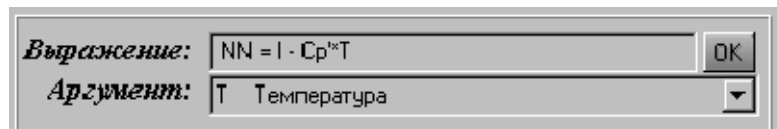


Рис. 40. Вид строки редактирования для задания пользователем произвольной функции

В качестве элементов выражения могут выступать идентификаторы приведённых в табл. 1 параметров, числовые константы, знаки арифметических операций, элементарные функции: $\sin()$, $\cos()$, $\operatorname{tg}()$, $\operatorname{ctg}()$, $\ln()$, $\lg()$, $\exp()$, $\arcsin()$, $\arccos()$, $\operatorname{sqrt}()$, $\operatorname{abs}()$. Арифметические выражения строятся по общепринятым правилам, аргументы элементарных функций записываются в круглых скобках, а для изменения порядка вычислений также используются круглые скобки произвольной степени вложенности.

Нажатие клавиши «ОК» приводит к отображению искомого графика, как это показано на рис. 41.

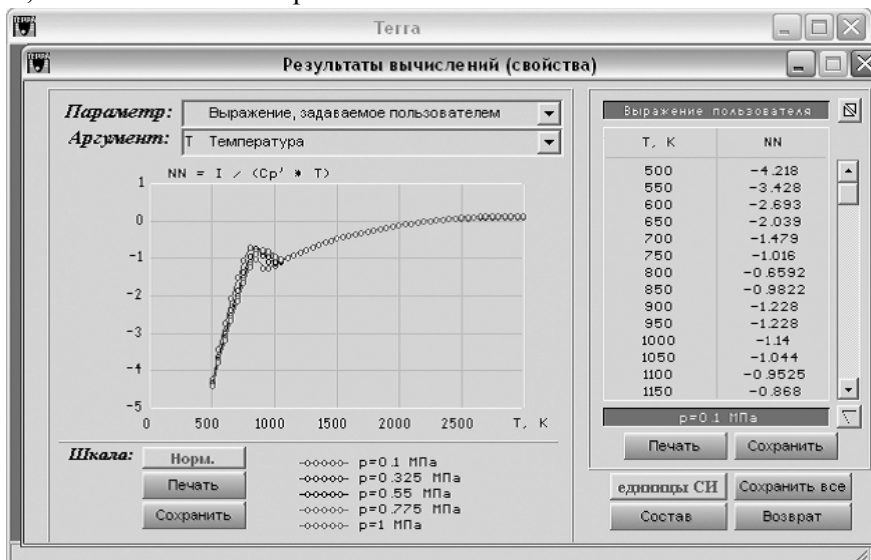


Рис. 41. Вид графика искомой зависимости в окне Результатов вычислений (свойства)

Пользователь осуществляет выбор либо линейной, либо логарифмической шкалы по обеим координатам. Последовательно нажимается первая кнопка поля *Шкала*. С её помощью изменяется масштаб представления результатов.

Две расположенные ниже кнопки дают возможность напечатать график, представленный на экране, или сохранить его в файле.

Перед печатью графика запрашивается тип принтера, подключенного к компьютеру, цветной или черно-белый (рис. 42.).

В зависимости от этого при выводе изменяется внешний вид маркеров, поскольку на черно-белом печатающем устройстве тона серого, используемые для рядом расположенных кривых, плохо различимы.

Перед печатью на экран выводится стандартная панель настройки принтера. С её помощью можно регулировать качество выводимого изображения. Лучшие результаты достигаются при использовании струйных принтеров (рис. 43).

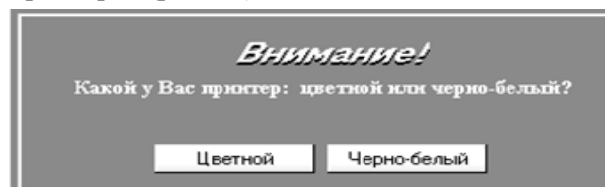


Рис. 42. Вид запроса типа принтера, подключенного к компьютеру

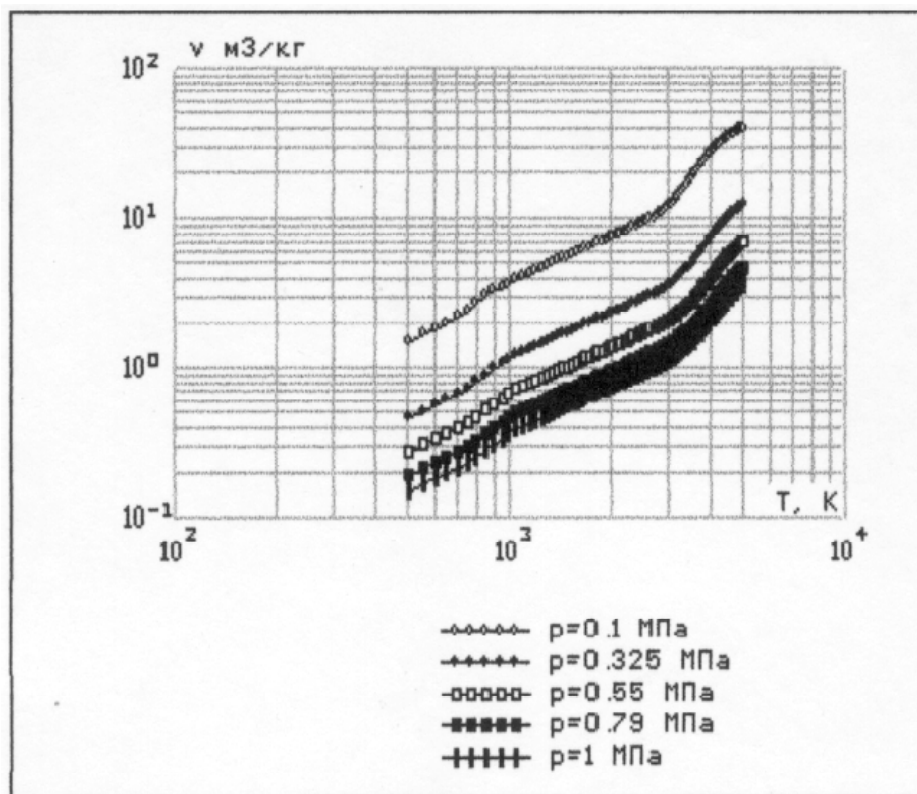


График функции "Удельный объем - Температура"
для исходного состава: (СО - 1) + (Н₂О - 1)

Рис. 43. Пример вывода на печать графика искомой зависимости

Процедура сохранения графика в файле может быть полезна, когда требуется вставить изображение в какой-либо документ. Файл сохраняется в растровом формате (.bmp), который обрабатывается практически любым текстовым и графическим редактором. Выбор имени файла и каталога для его размещения производится с помощью стандартной для Windows панели сохранения файла, представленной на рис 44.

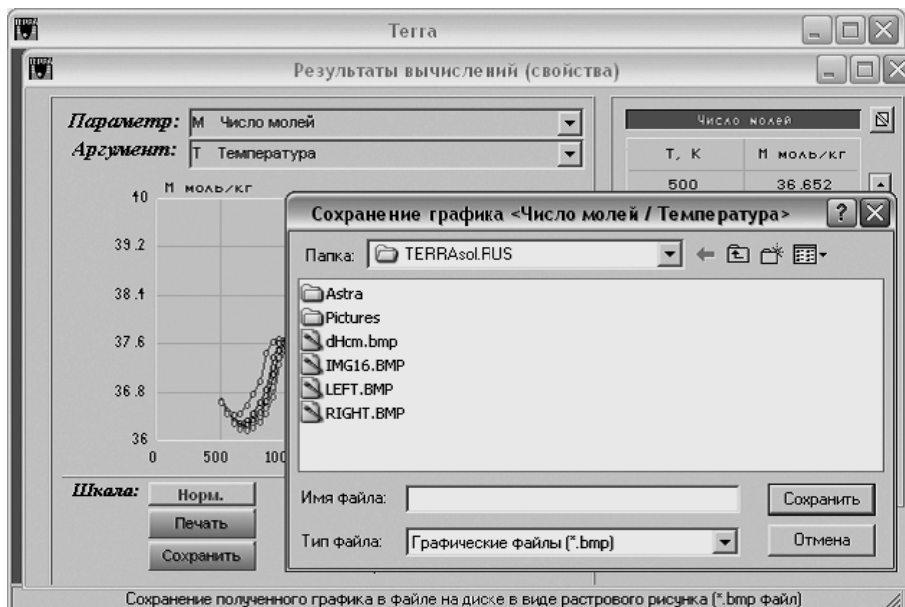


Рис. 44. Вид стандартной для Windows панели сохранения файла

Пример помещённого в файл графического изображения приведен на рис. 45. Сравнение изображения из файла с графиком, создаваемым на экране (см. рис. 38), показывает, что формат и общий вид чертежей тождественны.

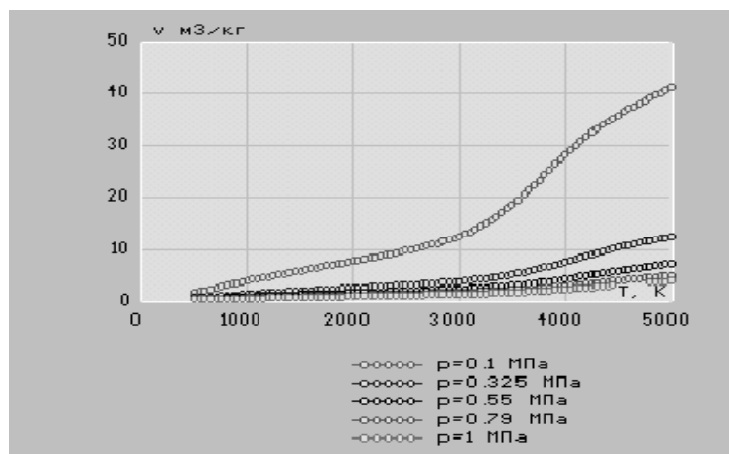


Рис. 45. Пример графического изображения, помещаемого в файл

На правой панели окна **Результатов вычислений (свойства)** (см. рис. 38) отображается таблица значений параметров РТ, найденных в результате расчётов. Это те же величины, что используются при построении графика. Тип аргумента и функции в таблице изменяются одновременно с перестроением графика.

Кнопки **Печать** и **Сохранить** позволяют выводить на печатающее устройство и сохранять в файле отображаемые на экране табличные значения. Формат вывода результатов в файл – текстовый, в кодировке Windows (.txt). На печатающее устройство результаты выводятся в виде таблицы с заголовком. Примеры вывода на печать и в файл приведены на рис. 46 и 47.

Таблица значений равновесных параметров
„Удельный объём – Температура”
для исходного состава: (СО – 1) + (Н₂О – 1)

p = 0,1 МПа E = var


T, K	v, м ³ /кг	T, K	v, м ³ /кг	T, K	v, м ³ /кг
500	1.5292	850	3.1142	1200	4.5501
550	1.6899	900	3.3799	1250	4.7397
600	1.8605	950	3.5944	1300	4.9293
650	2.0483	1000	3.7899	1350	5.1189
700	2.2627	1050	3.9808	1400	5.3085
750	2.5141	1100	4.1708	1450	5.4981
800	2.8063	1150	4.3605	1500	5.6876

Рис. 46. Вывод на печать результатов расчёта в виде таблицы с заголовком

Исходный состав: (СО – 1) + (Н ₂ О – 1)					
Состав, моль/кг: С 17.851 О 45.605 Н 55.509					
1-й параметр: Т = 500-1500-50					
2-й параметр: p = 0.1					

Удельный объём v, м ³ /кг					
Температура Т, К					
Значения при p=0.1 МПа					
Т	v	Т	v	Т	v
-----	-----	-----	-----	-----	-----
500	1.5292	850	3.1142	1200	4.5501
550	1.6899	900	3.3799	1250	4.7397
600	1.8605	950	3.5944	1300	4.9293
650	2.0483	1000	3.7899	1350	5.1189
700	2.2627	1050	3.9808	1400	5.3085
750	2.5141	1100	4.1708	1450	5.4981
800	2.8063	1150	4.3605	1500	5.6876

Рис. 47. Вывод на печать результатов текстового файла

Табличное представление результатов в виде зависимости одного единственного параметра от выбранного множества значений аргумента во всех расчетных точках не всегда бывает удобным для анализа. Иногда требуется компактно представить значения всех параметров в одной расчетной точке. Чтобы изменить характер вывода, достаточно нажать кнопку , расположенную в правом верхнем углу экранной формы. В результате таблица результатов примет вид, изображенный на рис. 48.



Параметр	Значение
P	0.1
T	750
v	2.5141
S	9.4445
I	-0.911 10 ⁴
U	-0.927 10 ⁴
M	40.318
Cp	1.7192
k	1.2422
Cp'	5.4033
k'	1.1876
Ap	0.00217
Bv	0.00209
bt	0.01038

p = 0.1 МПа

Печать Сохранить

Рис. 48. Вид таблицы результатов расчёта

Выбор расчетной точки, для которой выводятся результаты, осуществляется с помощью прокрутки комбинированного списка, расположенного в верхней части панели. В этом режиме печать таблицы и сохранение ее содержимого в файле происходит аналогично тому, как это было описано выше.

В правом нижнем углу окна вывода результатов располагаются четыре кнопки общего назначения, показанные на рис. 49.

Кнопка-переключатель **единицы СИ** определяет размерности выводимых величин: СИ/техн.сист.ед. Последовательное нажатие на неё вызывает перестройку графика и таблицы в требуемой размерности выводимых величин Дж кг К / кал кг К.

Кнопка **Сохранить всё** позволяет записать в файл все результаты расчета характеристик равновесия, т.е. параметры состояния рабочего тела и концентрации компонентов продуктов сгорания и их фаз. При сохранении результатов на экран выводится дополнительное окно (рис.50).



Рис. 49. Вид кнопок общего назначения

При выборе и нажатии кнопки **Таблица EXCEL** запрашивается имя файла и создается файл формата MS EXCEL с расширением .xls. На приведенном ниже фрагменте таблицы видно, что ее столбцы содержат как значения параметров состояния, так и концентрации компонентов равновесия (рис. 51).

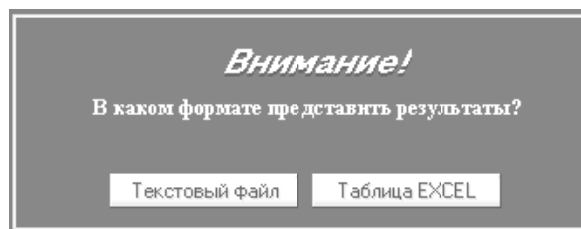


Рис. 50. Вид дополнительного окна при сохранении результатов расчёта

	A	B	C	D	E		AB	AC	AD	AE	AF
1	p	T	v	S	I		O	O2	O3	N	N2
2	1	500	0,141681	6,73178	203,181	1	1,93E-22	11,3603	7,92E-18	1,93E-22	22,72
3	1	1000	0,283361	7,47938	745,77	5	9,8E-10	11,3594	2,06E-10	2,6E-21	22,71
4	1	1500	0,425036	7,95865	1338,29	9	2,52E-05	11,3351	6,54E-08	5,34E-13	22,68
5	1	2000	0,56674	8,32526	1976,64	1	0,004134	11,2064	1,21E-06	7,91E-09	22,56
6	1	2500	0,709288	8,6393	2682,02	2	0,088214	10,873	7,18E-06	2,55E-06	22,27
7	1	3000	0,858375	8,9551	3551,97	2	0,668695	10,1479	2,43E-05	0,000121	21,84

Рис.51. Печать результатов расчёта при выборе кнопки **Таблица EXCEL**

Режим вывода в формате MS EXCEL облегчает последующую специальную обработку данных и позволяет переносить их в текстовый редактор MS WORD, используя буфер обмена данными.

При выборе и нажатии кнопки **Текстовый файл** результаты расчёта выводятся в виде таблицы, доступной для просмотра с помощью любых текстовых процессоров (MSWord, WordPad, Блокнот и др.) В операционной системе Windows это можно сделать с помощью текстового редактора Блокнот. Пример такого вывода показан на рис. 52.

Нажатие кнопки **Возврат** приводит к закрытию окна вывода результатов и возврату в основное окно программы.

Нажатие кнопки **Состав** приводит к закрытию окна вывода результатов с параметрами равновесного состояния и к открытию нового окна вывода результатов, в котором отображаются равновесные концентрации фаз рабочего тела (продуктов сгорания) исследуемой системы.


```

Исходный состав: (CO - 1) + (H2O - 1)
Состав, моль/кг: С 17.851 О 45.605 Н 55.509
1-й параметр: Т = 500-550-50
2-й параметр: р = 0.1
-----
Равновесные параметры при р=0.1 МПа, Т=500 К (единицы СИ):
р=0.1          Т=500          v=1.52922      S=8.23877      I=-9886.36
U=-9948        M=39.624          Cp=1.48205     k=1.26003     Cp'=1.82499
k'=1.21599    Ap=0.0020605     Bv=0.0020576  Gt=0.0100142  MMg=26.258
Rg=316.641    Cpg=1.49165      kg=1.26948     Cp'g=1.6923   k'g=1.24722
Mu=0.0000188  Lt=0.041226     Lt'=0.17860   Pr=0.681487   Pr'=0.17846
A=444.05      z=0.0340992
Равновесные концентрации (моль/кг):
Н = 0.20998      Н2О = 21.564      С(с) = 2.839      СО = 0.8517e-3
СО2 = 12.02      СН4 = 2.9904      С2Н4 = 0.4246e-11  С2Н6 = 0.1650e-5
Н2СО = 0.4462e-11  НСООН = 0.1601e-7  СН3ОН = 0.1652e-9  СН3СООН = 0.1316e-9
СН2О2 = 0.1571e-7
Равновесные параметры при р=0.1 МПа, Т=550 К (единицы СИ):
р=0.1          Т=550          v=1.68993      S = 8.42354     I=-9789.33
U=-9866.71     M=38.7833      Cp=1.5241      k=1.25251     Cp'=2.08091
k'=1.2034     Ap=0.0019488   Bv=0.0019417  Gt=0.0100367  MMg=26.4656
Rg=314.157    Cpg=1.52911    kg=1.25858     Cp'g=1.97149  k'g=1.22298
Mu=0.0000208  Lt=0.0474654   Lt'=0.355858  Pr=0.671556   Pr'=0.115488
A=458.849     z=0.0219559
Равновесные концентрации (моль/кг):
Н2=0.54557      Н2О=20.387      С(с)=1.828      СО=0.00583
СО2=12.606      СН4=3.4108      С2Н4=0.7803e-10  С2Н6=0.3664e-5
Н2СО=0.7505e-10  НСООН=0.5576e-7  СН3ОН=0.8817e-9  СН3СООН=0.3422e-11
СНЗСООН=0.3397e-9  СН2О2=0.5426e-7

```

Рис.52. Вывод таблицы результатов расчёта с помощью «Блокнота» ОС Windows

15. Представление равновесных концентраций компонентов фаз

Нажатие кнопки *Равновесный состав* на основном окне программы, а затем кнопки *Результаты* (см. рис. 37) приводит к открытию на экране дочернего окна, имеющего вид, показанный на рис. 53. То же происходит после нажатия кнопки *Состав* в окне с результатами вычисления свойств системы (см. раздел 13).

Нетрудно видеть, что структура представления информации в этом окне аналогична описанной выше. Однако имеется и ряд отличий, характерных для такой неструктурированной информации, как концентрации компонентов в системах произвольного химического состава.

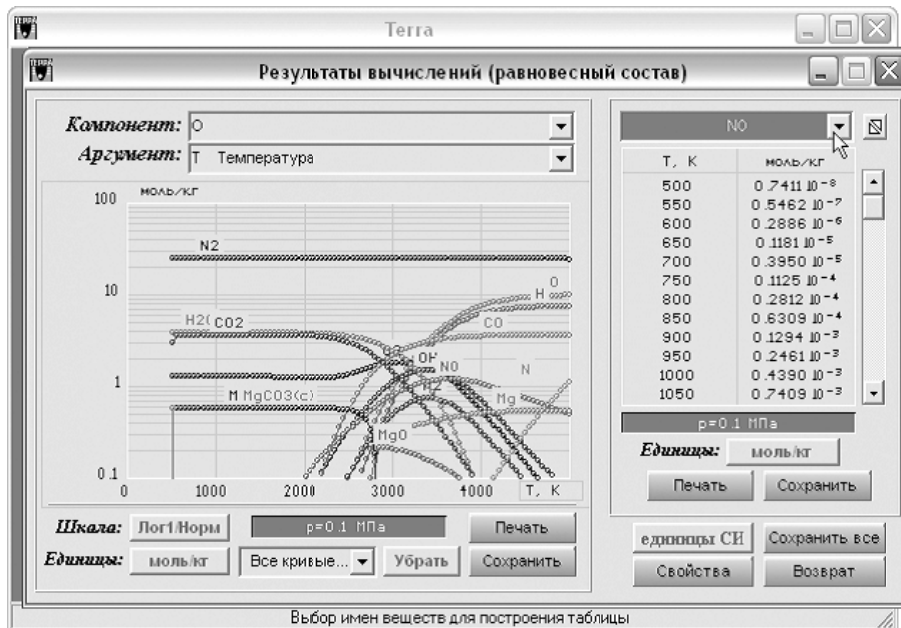



Рис. 53. Вид дочернего окна с результатами расчёта равновесного состава РТ

В момент создания окна, отображающего результаты вычисления равновесного состава, на графике представлены концентрации преобладающих компонентов. Добавление концентрационных зависимостей других индивидуальных веществ может быть выполнено путем выбора имен веществ из комбинированного списка, размещенного в верхней части левой панели. Соответственно, в нижней части панели размещены комбинированный список и кнопка **Убрать**, позволяющие аннулировать любую выбранную зависимость.

Кнопка **Единицы** дает возможность отображать концентрации в различных размерностях: моль/кг, мольные доли, массовые доли, объемные доли, парциальные давления, 1/см³.

Правая панель окна в зависимости от состояния переключателя  содержит либо таблицу зависимости концентрации индивидуального вещества от величины выбранного аргумента, либо список концентраций всех веществ при одном значении параметра равновесия, т.е. в одной расчетной точке (см. рис. 53 и 54).

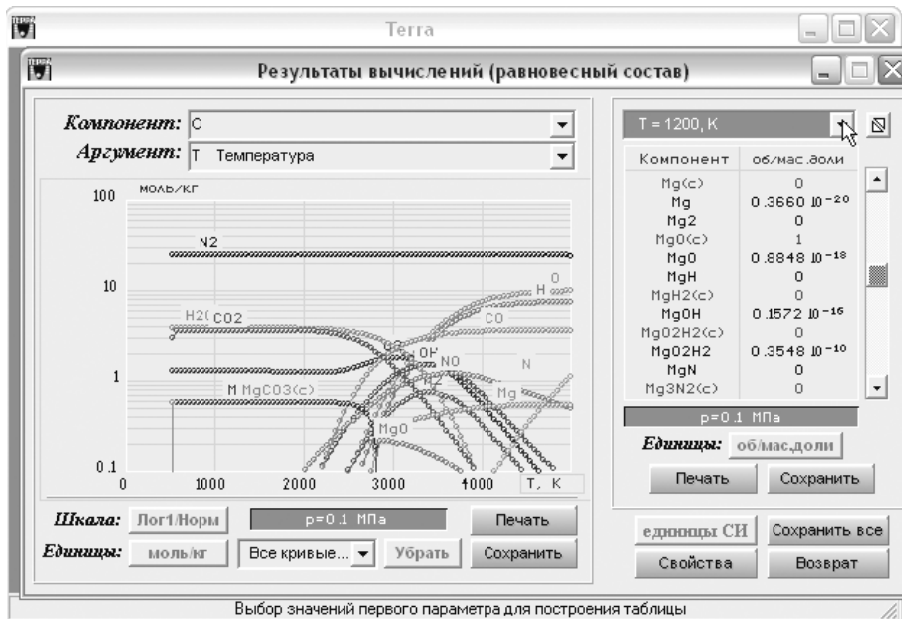


Рис. 54. Вид дочернего окна с графическим и табличным представлением результатов расчёта равновесного состава рабочего тела

Назначение кнопок **Печать** и **Сохранить** здесь такое же, что и в окне представления равновесных свойств системы. Но действие, производимое при нажатии кнопки **Сохранить все**, несколько отличается от ранее описанного в предыдущем разделе. При нажатии этой кнопки и затем выбора и нажатии кнопки **Таблица EXCEL** концентрации компонентов выводятся в размерности не только моль/кг, но и в любой другой, выбранной путем нажатия кнопки, расположенной рядом с надписью **Единицы**.

Кроме того, на правой панели окна, представленного на рис. 54, добавлена возможность одновременно отображать объемные доли газообразных компонентов и массовые доли конденсированных веществ, нормированные к единице.

Библиографический список

1. Алемасов, В.Е. Теория ракетных двигателей [Текст]: учеб. для студентов вузов / В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегалин, А.П. Тишин; под ред. В.П. Глушко.– М.: Машиностроение, 1989.– 464 с.
2. Добровольский, М.В. Жидкостные ракетные двигатели. Основы проектирования [Текст]: учеб. для вузов / М.В. Добровольский; под ред. Д.А. Ягодникова. – 2-е изд., перераб. и доп.– М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2005.– 448 с.
3. Основы теории и расчета жидкостных ракетных двигателей [Текст] / под ред. В. М. Кудрявцева. – М.: Высшая школа, 1983. – 704 с.
4. Конструкция и проектирование жидкостных ракетных двигателей [Текст]: учеб. для студентов по специальности «Авиационные двигатели и энергетические установки» / Г.Г. Гахун, В.И. Баулин, В.А. Володин [и др.]; под общ. ред. Г.Г. Гахуна.– М.: Машиностроение, 1989.– 424 с.
5. Егорычев, В.С. Топлива химических ракетных двигателей [Текст]: учеб. пособие/ В.С. Егорычев, В.С. Кондрусев.– Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2007.– 72 с.
6. Штехер, М.С. Топлива и рабочие тела ракетных двигателей [Текст]/ М.С. Штехер. – М.: Машиностроение, 1976.– 301 с.
7. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания [Текст]: справочник: в 10 т. / под ред. акад. В.П. Глушко. – М.: ВИНТИ АН СССР, 1971–1979.
8. Егорычев, В.С. Термодинамический расчёт и проектирование камер ЖРД [Текст]: учеб. пособие / В.С. Егорычев, В.С. Кондрусев.– Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2009.– 108 с.

Учебное издание

Егорычев Виталий Сергеевич

**РАСЧЁТ РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА,
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ РАКЕТНЫХ
ТОПЛИВ СПК TERRA**

Учебное пособие

Редакторская обработка Т.К. Кретицина.
Доверстка А.В. Ярославцева

Подписано в печать 02.09.2013. Формат 60×84^{1/16}
Бумага офсетная. Печать офсетная. Печ. л. 3,5.
Тираж 200 экз. Заказ . Арт. – 14/2013.

Самарский государственный аэрокосмический университет.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

Изд-во Самарского государственного аэрокосмического университета.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК