

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ РАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Климентьева Ю. И., Ковальчук С. В., Королев Д. В., Суворов К. А.

С-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

Современные методы расчета позволяют проводить термодинамические вычисления и определять параметры равновесного состояния (температуру, давление, энтальпию, энтропию, химический состав) различных горючих систем [1]. Для этого предназначены базы данных термодинамических свойств различных веществ [2, 3] и соответствующее программное обеспечение [1].

Методы определения параметров равновесного состояния описаны во многих отечественных и зарубежных литературных источниках для жидких ракетных топлив и для гетерогенных конденсированных систем (ГКС). Однако, одни из них устарели, поскольку касаются ограниченного круга смесей и имеют множество допущений, дающих весьма приблизительные результаты [4]. Другие имеют неточности и «недомолвки», не позволяющие воспроизвести расчеты с применением изложенного алгоритма [1]. Все это ограничивает круг использования подобных программ и не дает возможности внесения изменений, ориентированных на конкретные задачи.

Цель работы — создание программного комплекса открытой архитектуры для расчета термодинамических параметров равновесия продуктов сгорания ГКС.

Программный комплекс состоит из электронной базы термодинамических свойств индивидуальных веществ и программы, реализующей расчет параметров термодинамического равновесия продуктов сгорания ГКС.

Электронная база данных содержит термодинамические свойства веществ, наиболее часто используемых при изготовлении и разработке ГКС, и имеет возможность дополнения.

Алгоритм расчета основан на следствии из второго закона термодинамики, гласящего, что равновесное состояние в системе устанавливается при максимальной энтропии.

В основу расчета положена методика [1].

Энтропия системы определяется соотношением

$$S = \sum_{i=1}^k \left(S_i^0 - R \ln \frac{RT}{v} M_i \right) M_i + \sum_{n_1=1}^{N_1} (S_{X_1}^0 - R \ln(M_{X_2} / M_{X_1}) M_{X_1} + \\ + \sum_{n_2=1}^{N_2} (S_{X_2}^0 - R \ln(M_{X_1} / M_{X_2}) M_{X_2} + \sum_{j=1}^r S_j^0 M_j,$$

где S — энтропия системы;

S_i^0, S_j^0 — энтропия веществ в газовой и конденсированной фазах соответственно;

R — универсальная газовая постоянная;

T — температура;

v — объем;

M_i — число молей i -го газообразного соединения в 1 кг смеси;

k — количество газообразных соединений в смеси;

M_j — число молей конденсированных соединений в 1 кг смеси;

r — количество конденсированных соединений в смеси;

M_{X_1}, M_{X_2} — число молей соединения 1 и соединения 2 в растворе;

N_1, N_2 — число соединений 1 и соединений 2 в растворе.

При поиске максимума энтропии учитываются дополнительные условия

1. Постоянство внутренней энергии

$$-U_{\Pi} + \sum_{i=1}^k M_i U_{\Pi i} + \sum_{j=1}^r M_j U_{\Pi j} = 0,$$

2. Закон сохранения массы элементов

$$-[\mathcal{E}L_l] + \sum_{i=1}^k M_i n_{li} + \sum_{j=1}^r M_j n_{lj} = 0, (l = 1, 2, \dots, m);$$

где U_{Π} — внутренняя энергия;
 $\mathcal{E}L_l$ — число молей химического элемента в системе;
 m — число химических элементов в системе;
 n — число атомов элемента в веществе.

Поиск максимума энтропии

Поиск максимума энтропии основан на методе неопределенных множителей Лагранжа. В отличие от [1] система уравнений не линеаризуется с введением новых допущений, а оптимизируется методом Нелдера-Мида.

База данных термодинамических свойств веществ реализована в Microsoft Access. Это позволяет просматривать и редактировать данные с использованием стандартных средств.

Программный комплекс реализован с использованием языка html, что дает возможность вносить изменения в исходный текст и адаптировать алгоритм под конкретные задачи.

1. Синярев Г. Б., Ватолин Н. А., Трусев Б. Г., Моисеев Г. К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. — М.: Наука, 1982.— 236 с.

2. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное издание в четырех томах // Л. В. Гуревич, И. В. Вейц, В. А. Медведев и др. — Т. 1. Кн. 1. — М.: Наука, 1978. — 496 с.

3. Gurvich, L.V., Iorish, V.S., Chekhovskoi, D.V., Yungman, V.S. IVTANTHERMO. A Thermodynamic Database and Software System for the Personal Computer. User's Guide. CRC Press, Inc., Boca Raton, 1993.

4. Болгарский А. В. Расчет процессов в камере сгорания и сопле жидкостного ракетного двигателя. — М.: Оборонгиз, 1957. — 95 с.