

Вариационное исчисление как фундамент исследования течения среды при учете уравнения состояния реальных газов

Назырова Р.Р.

Исследовательский центр имени М.В. Келдыша,

Онежская ул., 8, Москва, 125438, Россия

e-mail: ctdsoft@mail.ru

Аннотация

Представлены математические модели процесса адиабатного течения в сопле камеры ЖРД при учете уравнения состояния реального газа, основывающиеся на вариационном исчислении. Применительно к упрощенным на основе осреднения интегралов моделям приведены оценки адекватности результатов расчетов исходной постановке и оценки достижения решением приемлемой точности вычислений. На основе анализа результатов численных исследований при учете уравнения состояния реального газа постулировано, что по мере расширения в сопле скорость потока увеличивается, а вязкость и теплопроводность уменьшаются, причем изменения не превышают в большинстве случаев 0,5 %.

Ключевые слова: сопло, камера жидкостного ракетного двигателя, равновесное состояние, реальный газ.

Введение

Современный этап проектирования конкурентоспособных жидкостных ракетных двигателей (ЖРД) основывается на применении разнообразных математических моделей [1, 2, 3, 4], включающих знания как из области механики жидкости и газа, так и химической термодинамики. Математические модели

- с одной стороны, обеспечивают возможности в проведении исследований при наибольшей идеализации процессов, например с помощью учета уравнения состояния идеального газа

$$pV = R_0TN, \quad (1)$$

где p – давление, Па, V – объем, м³, R_0 – универсальная газовая постоянная,

$\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$, T – температура, К, N – суммарное число молей газовой фазы, моль,

- с другой стороны, позволяют учитывать специфические особенности явлений, например принять во внимание межмолекулярные взаимодействия веществ на основе учета уравнений состояния реальных газов [5].

Принято, что наиболее универсальная форма уравнения состояния реального газа имеет вид [5, 6]

$$pV = R_0TN \left(1 + \frac{BN}{V} \right), \quad (2)$$

где B , $\frac{\text{м}^3}{\text{моль}}$ – второй вириальный коэффициент, для которого справедливо

$$B(p, T, \bar{n}) = \sum_{i \in B(g)} x_i B_i(p, T, \bar{n}) \quad \text{при} \quad B_i(p, T, \bar{n}) = \sum_{j \in B(g)} x_j B_{ij}(T). \quad \text{Для каждого из}$$

вириальных коэффициентов B_{ij} , $\frac{\text{м}^3}{\text{моль}}$, описывающих взаимодействие веществ $i, j \in B_{(g)}$, где $B_{(g)}$ есть множество газообразных индивидуальных веществ, определено [5, 7] $B_{ij}(T) = c_{ij} B_{ij}^{(*)}(T_{ij}^{(*)})$, где приведенный второй вириальный коэффициент $B_{ij}^{(*)}(T)$ является выпуклой функцией, имеющей максимум, и притом единственный [7]. Сравнение значений $B_{ij}^{(*)}(T)$, представленных в работах [5, 7] и частично отображенных на рисунке 1, приводит к выводу о потере функцией $B_{ij}^{(*)}(T)$ перечисленных свойств в случае вычисления ее значений по полиномам [5].

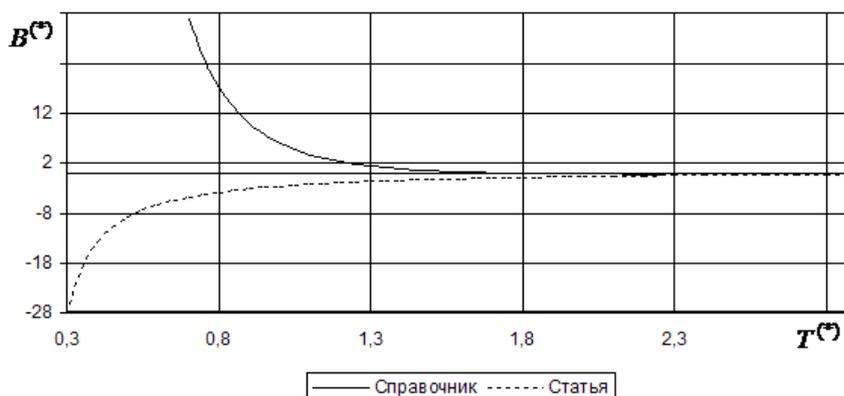


Рисунок 1 – Зависимость $B^{(*)}$ от $T^{(*)}$, $T^{(*)} \in [0,3;2,9]$

Стремление к получению более точных результатов приводит ряд авторов к использованию уравнений состояния реального газа более высокого порядка [5, 6, 7]. Очевидно, что какой бы порядок применяемое уравнение состояния реального газа не имело, анализ результатов вычислений имеет смысл только в том случае, если результаты расчетов адекватны исходным математическим моделям и

удовлетворяют с приемлемой точностью корректным оценкам, на что в большинстве работ не обращается должного внимания.

Представляемая работа посвящена описанию основанных на вариационном исчислении математических моделей процесса течения многокомпонентных смесей веществ в сопле камеры ЖРД, исследованию свойств множеств, функций и задач моделей, определению критериев адекватности исходным положениям и оценкам по точности получаемых решений и исследованию влияния уравнения состояния реальных газов на такие фундаментальные параметры механики жидкости и газа, как вязкость η , Н·с/м², теплопроводность λ , Вт·м/К, число Маха M , скорость потока w , м/с.

Математические модели равновесных состояний при учете уравнения состояния реального газа

Расчет параметров процесса течения многокомпонентных смесей веществ в сопле камеры ЖРД реализуется при ряде ограничений, наиболее важными из которых являются следующие [5, 8].

- Определение не менее, чем макроскопического уровня исследований или игнорирование чрезвычайно малых форм и масс и чрезвычайно малых действий и воздействий.

- Постулирование стационарности, безотрывности и одномерности течения продуктов сгорания в сопле, а также отсутствия или чрезвычайной малости воздействий полей и эффектов, определяющих, в частности, отсутствие трения и

других диссипативных воздействий, ограничение множества геометрических характеристик описания любой многокомпонентной смеси веществ параметром – объем.

- Введение возможности исследования процессов в камере ЖРД в терминологии понятий, аксиом и утверждений термодинамики многокомпонентных смесей веществ, то есть определение справедливости представлений: состояние многокомпонентной смеси веществ в любой момент времени в любом сечении сопла является равновесным и устойчивым; взаимодействия многокомпонентной смеси веществ на внешнем и внутреннем уровнях проявляются не более, чем в механической, тепловой и химической формах и не менее, чем на атомном уровне; процесс течения многокомпонентной смеси веществ в сопле камеры ЖРД является равновесным и адиабатным.

В любой момент времени термодинамической системе, образуемой данной многокомпонентной смесью веществ, сопоставляется одна, и только одна, точка замкнутого, полного и компактного множества $\mathfrak{N} = \{\bar{n}/\bar{n} = (N, \dots, x_j, \dots, n_k, \dots)\}$, где $x_j \in [0,1]$, $j \in B_{(g)}$, $n_k \in [0, n^{(\max)}]$, $k \in B_{(c)}$, $N \in [\varepsilon_N, N^{(\max)}]$ и где справедливы отношения: $x_j \in [0,1]$ для мольной доли x_j любого вещества $j \in B_{(g)}$, $n_k \in [0, n^{(\max)}]$ для числа молей n_k вещества $k \in B_{(c)}$, $B_{(c)}$ – множество индивидуальных веществ в конденсированном состоянии, $N \in [\varepsilon_N, N^{(\max)}]$ для суммарного числа молей N веществ из множества $B_{(g)}$ при $N^{(\max)}$ – некоторая константа, зависящая от химической формулы условной исходной молекулы смеси веществ.

Известные значения координат точки $\bar{n} \in \aleph$, молярной энтальпии $H_j^{(r)}(T)$,

$\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ и молярной энтропии $S_j^{(r)}(T)$, $\frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{моль}}$ веществ $j \in B$, где $B = B_{(g)} \cup B_{(c)}$,

обуславливают определенность значений термодинамических потенциалов, а именно, энтальпии $H^{(\delta)}(p, T, \bar{n})$, где

$$H^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B_{(g)}} x_j H_j^{(\delta)}(T) + \sum_{j \in B_{(c)}} n_j H_j(T),$$

энтропии $S^{(\delta)}(p, T, \bar{n})$, где

$$S^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B_{(g)}} x_j S_j^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) + \sum_{j \in B_{(c)}} n_j S_j(T)$$

и энергии Гиббса $G^{(\delta)}(p, T, \bar{n})$, где

$$G^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B_{(g)}} x_j G_j^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) + \sum_{j \in B_{(c)}} n_j G_j(T)$$

и где $G_j^{(\delta)}(p, T, \bar{n})$ есть химический потенциал, нередко обозначаемый в виде $\mu_j^{(\delta)}(p, T, \bar{n})$. При этом, если структура " (δ) " заменена на " (r) ", то принимается, что функция отображает свойства системы при учете уравнения (2), иначе – при учете уравнения (1).

Результаты аналитических исследований авторов работ [5, 9] позволяют для молярного парциального объема $v_j^{(\delta)}$ вещества $j \in B_{(g)}$ определить

$$\mu_j^{(r)}(p, T, \bar{n}) = \mu_j(p, T, \bar{n}) - \int_0^p [v_j(p, T, \bar{n}) - v_j^{(r)}(p, T, \bar{n})] dp.$$

При определении $\mu_j^{(r)}(p, T, \bar{n}) = \mu_j(p, T, \bar{n}) - \int_0^p \alpha_j(p, T, \bar{n}) dp$ и представлении [5]

$$\alpha_j(p, T, \bar{n}) = B(p, T, \bar{n}) - 2B_j(p, T, \bar{n}) \quad (3)$$

получается

$$G^{(r)}(p, T, \bar{n}) = G(p, T, \bar{n}) + A_G(p, T, \bar{n}), \quad (4)$$

$$S^{(r)}(p, T, \bar{n}) = S(p, T, \bar{n}) + A_S(p, T, \bar{n}), \quad (5)$$

$$H^{(r)}(p, T, \bar{n}) = H(p, T, \bar{n}) + A_H(p, T, \bar{n}), \quad (6)$$

где

$$A_G(p, T, \bar{n}) = -N \sum_{k \in B(g)} x_k \int_0^p \alpha_k(p, T, \bar{n}) dp, \quad (7)$$

$$A_S(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B(g)} x_j \int_0^p \left(\frac{\partial \alpha_j(p, T, \bar{n})}{\partial T} \right)_{p, \bar{n}} dp, \quad (8)$$

$$A_H(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B(g)} x_j \int_0^p \left\{ T \left(\frac{\partial \alpha_j(p, T, \bar{n})}{\partial T} \right)_{p, \bar{n}} - \alpha_j(p, T, \bar{n}) \right\} dp. \quad (9)$$

Практика исследований влияния на параметры сопла камеры ЖРД межмолекулярных взаимодействий веществ привела к выводу о появлении относительно значимых отклонений относительно идеальной модели не ранее, чем в минимальном сечении [5]. Отсюда выводится, что в качестве наиболее значимых выступают следующие равновесные состояния.

1. Равновесное состояние $p_0, S_0 = const$ – термодинамическая система находится под давлением p_0 и обладает энтропией S_0 . Математическая модель

представляется экстремальной задачей

$$\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{n} \in \mathbb{N}} H^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) \quad (10)$$

при справедливости уравнения нормировки

$$\sum_{j \in B(g)} x_j = 1, \quad (11)$$

системы уравнений сохранения вещества

$$N \sum_{j \in B(g)} a_{ij} x_j + \sum_{j \in B(c)} a_{ij} n_j = b_i, i \in X, \quad (12)$$

где X — множество химических элементов, b_i — количество грамм атомов элемента X_i в химической формуле условной молекулы смеси веществ и уравнения постоянства приведенной энтропии

$$\bar{S}^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) = \bar{S}_0, \quad (13)$$

где $\bar{S}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = -\frac{S^{(\delta)}(p, T, \bar{n})}{R_0}$.

2. Равновесное состояние $p_0, T_0 = const$ — термодинамическая система находится под давлением p_0 и при температуре T_0 . Математическая модель представляется экстремальной задачей

$$\min_{\bar{n} \in \mathbb{N}} \bar{G}^{(\delta)}(p_0, T_0, \bar{n}) \quad (14)$$

при справедливости (11)–(12), где $\bar{G}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = \frac{G^{(\delta)}(p, T, \bar{n})}{TR_0}$.

Дополнительно определяется, что для каждой из математических моделей в точке равновесного состояния справедливы: закон действующих масс, правило фаз

Гиббса, соотношения равенства химических потенциалов веществ в различных агрегатных состояниях.

Известные значения координат $\bar{n}^{(*)} \in \aleph$, а также $T^{(*)}$ и p_0 в равновесном состоянии обеспечивают расчет вязкости η , теплопроводности λ , числа Маха M и скорости потока w , м/с [5, 10], формулы расчета которых инвариантны относительно уравнений состояния газа.

Свойства функций и экстремальных задач математических моделей

Из непрерывности функций $H(p, T, \bar{n})$, $S(p, T, \bar{n})$ и $G(p, T, \bar{n})$ [11], а также из непрерывности параметров $B_j(p, T, \bar{n})$, $B(p, T, \bar{n})$, $\alpha_j(p, T, \bar{n})$ следует, что функции $H^{(r)}(p, T, \bar{n})$, $S^{(r)}(p, T, \bar{n})$ и $G^{(r)}(p, T, \bar{n})$ также непрерывны на соответствующих замкнутых и ограниченных, то есть компактных множествах определения. Следовательно, энтальпия, энтропия и энергия Гиббса системы достигают на множествах своего определения наименьших и наибольших значений, и любая бесконечная последовательность значений любой из функций является фундаментальной. Более того, в любой точке \bar{q} множества Q , эквивалентного множеству \aleph , где для каждого $\bar{q} = (N, \dots, v_j, \dots, n_k, \dots) \in Q$ и любого $j \in B_{(g)}$ справедливо $v_j = N x_j$, функции $H^{(r)}(p, T, \bar{n})$, $S^{(r)}(p, T, \bar{n})$ и $G^{(r)}(p, T, \bar{n})$ дифференцируемы по Фреше, а также в ряде случаев и выпуклы.

Как следует из анализа (10)–(14), каждая из экстремальных задач содержит интегралы, определяющие принадлежность каждой из задач ко множеству задач

вариационного исчисления. Применение технологии осреднения $\int_0^p \psi(p) dp = p \psi(p)$

позволяет существенно упростить постановки, а именно с помощью представлений

$$A_S(p, T, \bar{n}) = \frac{p}{T} N \sum_{j \in B(g)} x_j (B^{(+)} - 2B_k^{(+)}) = -\frac{pNB^{(+)}}{T}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} A_H(p, T, \bar{n}) &= pN \sum_{j \in B(g)} x_j \left\{ (B^{(+)} - B) - 2(B_j^{(+)} - B_j) \right\} = \\ &= pN \left\{ \sum_{j \in B(g)} x_j B^{(+)} - 2 \sum_{j \in B(g)} x_j B_j^{(+)} - \sum_{j \in B(g)} x_j B + 2 \sum_{j \in B(g)} x_j B_j \right\} = pN(B - B^{(+)}) \end{aligned} \quad (16)$$

при $T(\alpha_k)_T - \alpha_k = (B^{(+)} - 2B_k^{(+)}) - (B - 2B_k) = (B^{(+)} - B) - 2(B_k^{(+)} - B_k)$,

$$A_G(p, T, \bar{n}) = pNB \quad (17)$$

при $A_G(p, T, \bar{n}) = -pN \sum_{k \in B(g)} x_k \alpha_k(p, T, \bar{n})$ и $\sum_{k \in B(g)} x_k (-\alpha_k) = B$, где $B^{(+)} = \sum_{j \in B(g)} x_j B_j^{(+)}$,

$B_k^{(+)} = \sum_{j \in B(g)} x_j B_{kj}^{(+)}$, $B_{kj}^{(+)} = \frac{dB_{kj}}{d \ln T}$, выйти из множества задач вариационного

исчисления.

Известные координаты точки $\bar{n}^{(*)} \in \mathfrak{N}$, температуры, давления, представляющие в совокупности решение экстремальной задачи, позволяют вычислять η , λ , w . Однако для вычисления числа Маха необходимо знание

частных производных по давлению и температуре. Из $V^{(r)} = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, \bar{n}} + \left(\frac{\partial A_G}{\partial p} \right)_{T, \bar{n}}$

следует $V^{(r)} = V + NB$ и соотношения

$$\alpha_p^{(r)} = \frac{V}{V^{(r)}} \frac{1}{T} \left[1 + \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln T} \right)_p \right] + \frac{N}{TV^{(r)}} \left(\frac{\partial B}{\partial \ln T} \right)_p + \frac{BN}{TV^{(r)}} \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln T} \right)_p,$$

$$\beta_T^{(r)} = \frac{V}{V^{(r)}} \frac{1}{p} \left[1 - \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln p} \right)_T \right] - \frac{N}{pV^{(r)}} \left(\frac{\partial B}{\partial \ln p} \right)_T - \frac{BN}{pV^{(r)}} \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln p} \right)_T,$$

где $\alpha_p^{(\delta)}$ – изобарный коэффициент расширения, $\beta_T^{(\delta)}$ – изотермический

коэффициент сжатия. При учете $\left(\frac{\partial [NB]}{\partial \xi} \right)_\eta = \frac{N}{\xi} \left(\frac{\partial B}{\partial \ln \xi} \right)_\eta + \frac{BN}{\xi} \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln \xi} \right)_\eta$ получается

$$[\alpha_p T]^{(r)} = 1 + \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln T} \right)_p - \left(1 - \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}} \right) \left[1 - \frac{1}{B} \left(\frac{\partial B}{\partial \ln T} \right)_p \right],$$

$$[\beta_T p]^{(r)} = 1 - \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln p} \right)_T - \left(1 - \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}} \right) \left[1 + \frac{1}{B} \left(\frac{\partial B}{\partial \ln p} \right)_T \right]$$

ИЛИ

$$[\alpha_p T]^{(r)} = [\alpha_p T] - \left(1 - \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}} \right) \left[1 - \frac{2B^{(T)} + B^{(+)}}{B} \right], \quad (18)$$

$$[\beta_T p]^{(r)} = [\beta_T p] - \left(1 - \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}} \right) \left[1 + \frac{2B^{(p)}}{B} \right] \quad (19)$$

$$[\alpha_p T]_f^{(r)} = 1 - \left(1 - \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}} \right) \left[1 - \frac{B^{(+)}}{B} \right], \quad (20)$$

$$[\beta_T p]_f^{(r)} = \frac{R_0 TN}{pV^{(r)}}, \quad (21)$$

где $B^{(\tau)} = \sum_{j \in B_{(g)}} x_j B_j^{(\tau)}$, $B_k^{(\tau)} = \sum_{j \in B_{(g)}} x_j \left(\frac{\partial \ln x_j}{\partial \ln T} \right)_p B_{kj}$. При этом, если структура "(τ)"

заменена на структуру "(p)", то принимается, что рассматриваются производные по

давлению, иначе – производные по температуре. Соотношения (20)–(21) приводят к выводу: если для (1) справедливы равенства $[\alpha_p T]_f = 1$ и $[\beta_T p]_f = 1$, то для (2) выполняются неравенства $[\alpha_p T]_f^{(r)} \neq 1$ и $[\beta_T p]_f^{(r)} \neq 1$, представляющие первую физико-химическую оценку корректности решения. Из

$$\left(\frac{\partial A_H}{\partial T}\right)_p = \frac{pN}{T} \left\{ \left[\left(\frac{\partial B}{\partial \ln T}\right)_p - \left(\frac{\partial B^{(+)}}{\partial \ln T}\right)_p \right] + \left(\frac{\partial \ln N}{\partial \ln T}\right)_p [B - B^{(+)}] \right\}$$

выводится

$$Cp^{(r)} = Cp_f^{(r)} + (Cp - Cp_f) + \frac{\alpha_p T - 1}{T} A_H + 2pN(B^{(T)} - B^{(+,T)}) \quad (22)$$

при

$$Cp_f^{(r)} = Cp_f + \frac{pN}{T} [B^{(+)} - B^{(+,+)}, \quad (23)$$

где $Cp, \frac{Дж}{К}$ – теплоемкость реагирующей системы при $p = const$, $Cp_f, \frac{Дж}{К}$ – теплоемкость замороженной системы при $p = const$. Известные данные определяют

справедливость $Cv_{(s)}^{(\delta)} = Cp_{(s)}^{(\delta)} - R_0 N \frac{([\alpha_p T]_{(s)}^{(\delta)})^2}{[\beta_T p]_{(s)}^{(\delta)}}$, $\kappa_{(s)}^{(\delta)} = \frac{Cp_{(s)}^{(\delta)}}{Cv_{(s)}^{(\delta)}}$, откуда получается

$$a_{(s)}^{(\delta)} = \sqrt{\frac{\kappa_{(s)}^{(\delta)} p}{[\beta_T p]_{(s)}^{(\delta)} \rho_{(s)}^{(\delta)}}}, \quad (24)$$

где $Cv, \frac{Дж}{К}$ – теплоемкость при $V = const$, κ – коэффициент адиабаты, a , м/с – скорость звука. При этом, если структура "(s)" заменена на структуру "f", то

принимается, что рассматривается замороженная, иначе – реагирующая система. Аналитические исследования по выводу формальных выражений расчета производных от газодинамических параметров позволили постулировать: формальное определение (24) более эффективно по сравнению с определением скорости звука в [5].

Известные положения термодинамики [9] приводят к выводу: положительные значения C_v , $[\beta_T p]$ обуславливают, что равновесное состояние системы наиболее вероятно является термически и механически устойчивым – вторая физико-химическая оценка корректности решения.

Как следует из описанных свойств, каждая из экстремальных задач (10)–(14) независимо от вида учитываемого уравнения состояния имеет решение, если множество $Q^{(0)} \in Q$ решений системы уравнений, включающей уравнение нормировки

$$\sum_{j \in B(g)} v_j = N, \quad (24)$$

а также систему уравнений сохранения вещества

$$\sum_{j \in B(g)} a_{ij} v_j + \sum_{j \in B(c)} a_{ij} n_j = b_i, i \in X, \quad (25)$$

эквивалентной (11)–(12), не пусто. Система уравнений (24)–(25) линейна, то есть ее разрешимость достаточно просто определяется методами линейного программирования. В частности, для гомогенной смеси веществ система уравнений (24)–(25) всегда имеет, как минимум одно, решение $n_i = b_i$, где $i \in A_{(g)}$ и $A_{(g)}$ есть

множество газообразных веществ, то есть для гомогенных систем задача (14) всегда разрешима.

Фундаментальные основы технологии расчетов и оценки решений

Следующий шаг в снижении уровня сложности экстремальных задач (10)–(14) заключается в структуризации. Структуризация задачи (14) приводит ее к виду [12]

$$\min_{\{B_j | j \in B_{(g)}\}} G^{(r)}(p, T, \bar{n}^{(*)}), \quad (26)$$

где точка $\bar{n}^{(*)} \in \mathfrak{N}^{(0)}$ взаимно–однозначно соответствует решению $\bar{q}^{(*)} \in Q^{(0)}$ задачи

$$\min_{\bar{n} \in \mathfrak{N}^{(0)}} G^{(r)}(p, T, \bar{n}, \{B, B_j | j \in B_{(g)}\}). \quad (27)$$

Из выпуклости функции $\bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j | j \in B_{(g)}\})$, где

$$\bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j | j \in B_{(g)}\}) = \bar{G}(p, T, \bar{q}) + \frac{pNB}{R_0T},$$

на множестве Q выводится, что задача

$$\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} \bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j | j \in B_{(g)}\}), \quad (28)$$

эквивалентная задаче (27), относится ко множеству задач выпуклого программирования, то есть решается методами выпуклого программирования, в частности, методами условного градиента и Лагранжа–Ньютона, обеспечивающими выполнение дополнительных положений представленных математических моделей [11, 12]. Отсюда также выводится математическая корректность определения в

качестве оценки достижения достаточно малой окрестности решения выражения [11]

$$\left\langle \text{grad} \bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}), \bar{q} - \bar{q}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon_G, \quad (29)$$

где ε_G - положительно, достаточно малое, приемлемое по точности для приведенной энергии Гиббса, число.

Структуризация задачи (10)–(13) приводит ее к виду [12]

$$\min_{\{B_j \mid j \in B_{(g)}\}} H^{(r)}(p, T, \bar{n}^{(*)}), \quad (30)$$

где точка $\bar{n}^{(*)} \in \mathfrak{N}^{(0)}$ взаимно-однозначно соответствует решению $\bar{q}^{(*)} \in Q^{(0)}$ задачи

$$\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{q} \in Q^{(0)}} H^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}), \quad (31)$$

при ограничении

$$\bar{S}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}) = \bar{S}_0, \quad \bar{q} \in Q^{(0)}. \quad (32)$$

Задача (31)–(32) не относится ко множеству задач линейного программирования, однако из свойств функций следует, что она не разрешима, если множество $Q^{(0)}$ пусто. В соответствии с результатами работы [11] представляется корректным положить, что в достаточно малой окрестности решения задача (30)–(32) эквивалентна задаче решения уравнения $\bar{S}^{(r)}(p, T, \bar{q}^{(*)}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}) = \bar{S}_0$ относительно температуры, где $\bar{q}^{(*)}$ есть решение задачи (26)–(27). Если существует, по крайней мере одна, температура, для которой задача (31)–(32) разрешима, то задача (30)–(32) также разрешима.

В качестве математически корректной оценки достижения достаточно малой окрестности решения (30), (32) предлагается принять неравенство

$$\left\langle \text{grad } H^{(r)}\left(p, \bar{\xi}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}\right), \bar{\xi} - \bar{\xi}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon_H, \quad (33)$$

где $\bar{\xi} \in [\underline{T}, \bar{T}] \times Q_S$, ε_H - положительно, достаточно малое, приемлемое по точности для энтальпии, число и где для любой точки \bar{q} множества $Q_S \subseteq Q^{(0)}$ справедливо (32). Из [11] следует: из справедливости для $\bar{\xi} \in (T^{(*)}, \bar{q}^{(*)})$ неравенства (33) выводится выполнение точкой $\bar{q}^{(*)}$ оценки (29).

Аналогии в математических моделях (10)–(14), а также взаимосвязь в представлениях (4)–(6) термодинамических потенциалов для идеального и реального газов приводят к выводу, с одной стороны, о представлении решения задач (10)–(14) при учете (1) в качестве начального приближения для соответствующих задач при учете (2), с другой стороны, к заключению о преимственности технологий расчетов [11]. То есть, фундамент расчетов составляет решение задачи (28) для последовательности значений $\{B^{(ll)}, B_j^{(ll)}\}_{ll=0,1,\dots}$ при

$$j \in B_{(g)}, \text{ где } B^{(ll)} = \sum_{j \in B_{(g)}} x_j^{(ll-1)} B_j^{(ll)}, \quad B_j^{(ll)} = \sum_{k \in B_{(g)}} x_k^{(ll-1)} B_{jk} \text{ и где в качестве точки } \bar{q}^{(0)}$$

выступает решение (14) при учете (1). Применение метода Лагранжа для задачи (28) обуславливает построение нелинейной системы уравнений вида

$$\bar{f}\left(\bar{\sigma}^{(ll)}\right) - \bar{\theta}\left(\bar{\gamma}^{(ll)}\right) = 0, \quad (34)$$

где векторное уравнение

$$\bar{f}\left(\bar{\sigma}^{(ll)}\right)=0$$

есть результат применения метода Лагранжа для решения задачи (14) при учете (1),

а для ненулевых координат вектора $\bar{\theta}\left(\bar{\gamma}^{(ll)}\right)$, в частности, определено

$$\theta_j\left(\bar{\gamma}^{(ll)}\right)=\frac{p}{TR_0}\left(\alpha_j\left(\bar{\gamma}^{(ll)}\right)-\sum_{i \in A_{(g)}} a_{ij}\alpha_i\left(\bar{\gamma}^{(ll)}\right)\right),$$

где j представляет молекулярное газообразное вещество. Расчет производных от состава реализуется на основе дифференцирования векторного уравнения (34), где

$$\left(\frac{\partial \theta_j}{\partial \ln p}\right)_T = \theta_j + \frac{p}{TR_0} \left[\left(\frac{\partial \alpha_j}{\partial \ln p}\right)_T - \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} a_{ij} \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln p}\right)_T \right],$$

$$\left(\frac{\partial \theta_j}{\partial \ln T}\right)_p = -\theta_j + \frac{p}{TR_0} \left[\left(\frac{\partial \alpha_j}{\partial \ln T}\right)_p - \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} a_{ij} \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln T}\right)_p \right].$$

Исследование эффективности представляемых технологий расчетов

На рисунках 2–3 для топлива АТ+НДМГ при $K_m = 0,3$ представлены $c_v^{(r)}$, $[\beta_T p]^{(r)}$ – результат решения (14). Как видно, $c_v^{(r)} > 0$, $[\beta_T p]^{(r)} > 0$, $[\beta_T p]^{(r)} \neq 1$, то есть первый и второй критерии адекватности удовлетворены.

На рисунках 4–5 отображены значения относительных отклонений температур, расчет которых выполнен на основе решения (10)–(13) и применении формулы

$$\delta_\Phi = 100\left(\Phi - \Phi^{(r)}\right)/\Phi, \% , \quad (35)$$

где $\Phi \in \{T\}$. Итак, отклонения по температуре не превышают 0,1%, то есть незначительны, обеспечивая справедливость известных положений термодинамики.

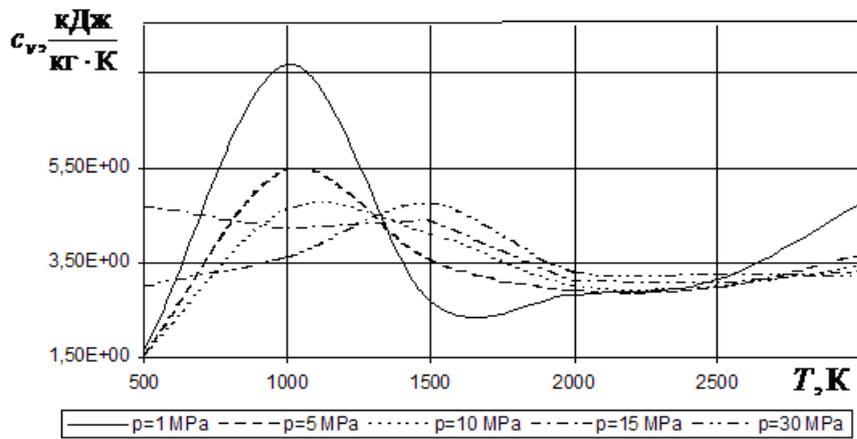


Рисунок 2 – Зависимость отклонения c_v от T

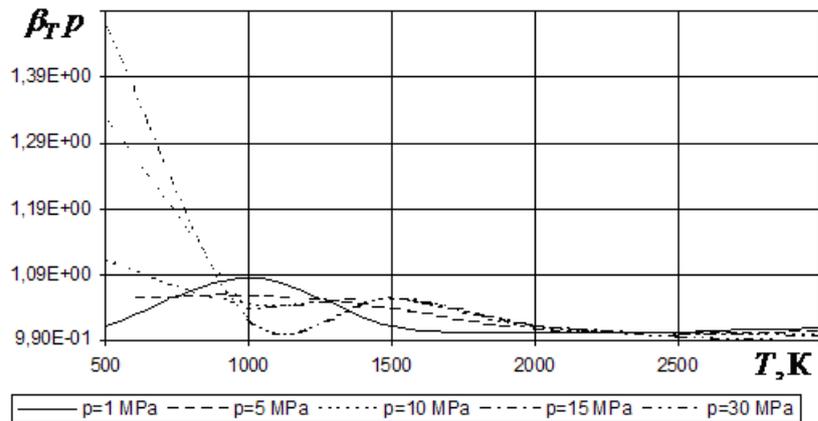


Рисунок 3 – Зависимость отклонения $\beta_T p$ от T

Исследование процесса течения в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя при учете уравнения состояния реального газа

На рисунках 6–9 представлены результаты расчета скорости потока w , а также относительных отклонений δ_Φ , δ_η , δ_λ , вычисляемых по формуле (35), где

$\Phi \in \{w, \eta, \lambda\}$ и где $p_0 = 30 \text{ МПа}$, $K_m = 5$.

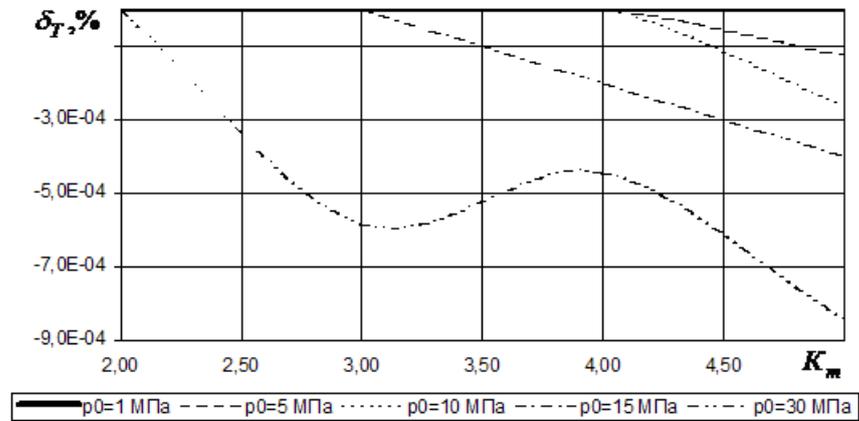


Рисунок 4 – Зависимость отклонения δ_T от K_m для топлива O2+PG-1

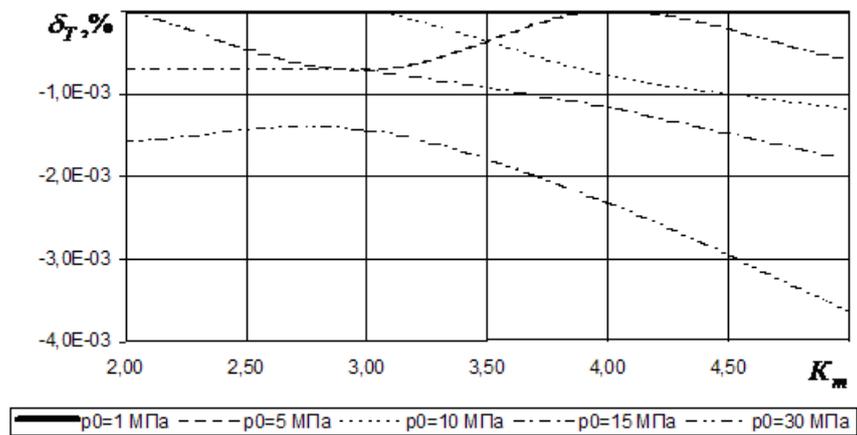


Рисунок 5 – Зависимость отклонения δ_T от K_m для топлива AT+HDMG

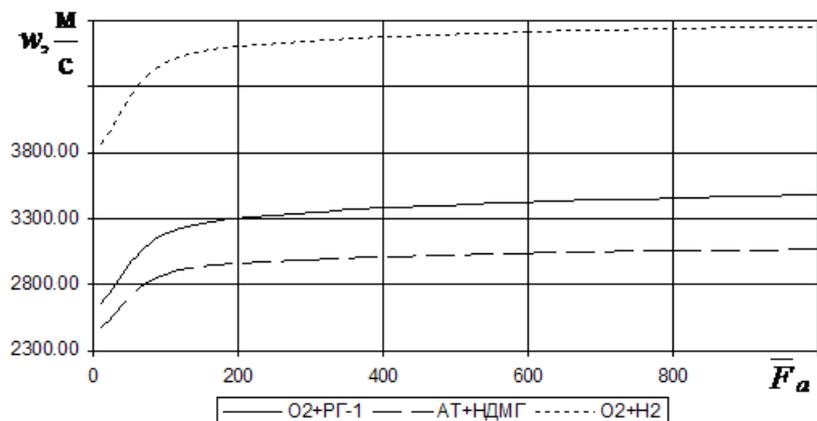


Рисунок 6 – Зависимость w от \bar{F}_a

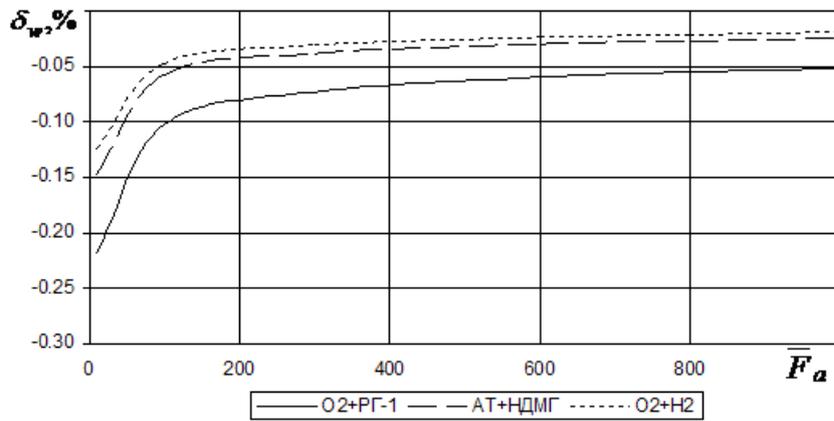


Рисунок 7 – Зависимость δ_w от \bar{F}_a

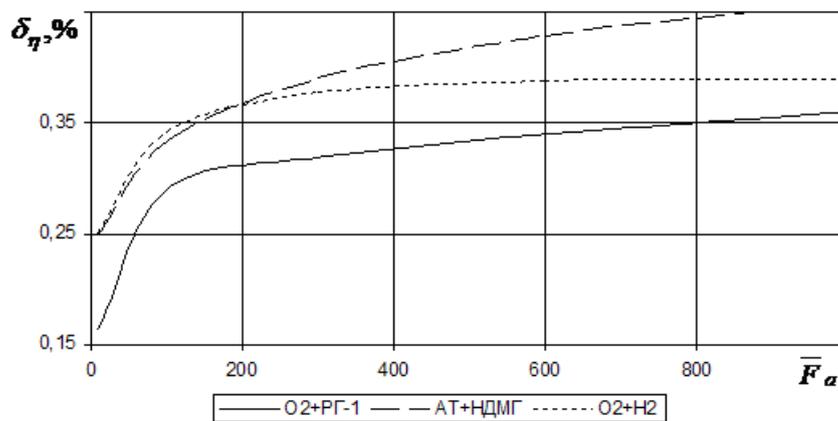


Рисунок 8 – Зависимость δ_η от \bar{F}_a

- параметр δ_λ характеризуется более высокой чувствительностью к точности расчетов, в частности, снижение точности расчетов с 7 знаков до 5 при $\bar{F}_a = 10$ определило значимое увеличение значения до 1,2 %,
- в то время, как отклонения по скорости δ_w по абсолютному значению не превышают 0,25 %, отклонения по вязкости δ_λ и теплопроводности δ_λ достигают в большинстве случаев не более 0,5 %,
- отклонения по скорости δ_w отрицательно по всему соплу, а отклонения по вязкости и теплопроводности положительны, то есть учет уравнения состояния

реального газа, с одной стороны, приводит к увеличению скорости потока, но, с другой стороны, обуславливает уменьшение вязкости и теплопроводности.

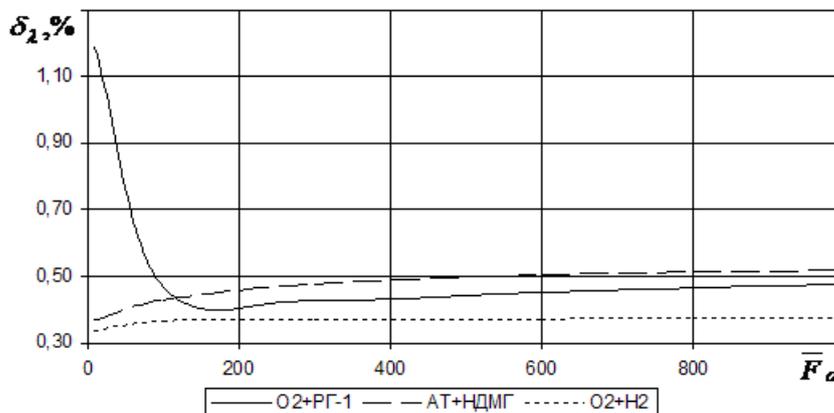


Рисунок 9 – Зависимость δ_λ от \bar{F}_a

Заключение

Основу вычислений параметров текучих сред в соплах жидкостных ракетных двигателей в общем случае составляют вариационные математические модели. Снижение сложности вариационных математических моделей производится за счет осреднения интегралов и структуризации постановок экстремальных задач. Эквивалентные преобразования задач позволяют сформулировать условия разрешимости и представить соотношения определения адекватности и удовлетворения приемлемой точности решений. Проведен численный анализ влияния уравнения состояния реального газа на фундаментальные параметры течения. Результаты исследования отображены для различных топлив и геометрических характеристик.

Работа выполнена в рамках Государственного контракта № 251 – 0214/12.

Численные данные получены на основе применения программных комплексов CTDsoftRG, TDsoftRGXL, по которым получены Свидетельства об интеллектуальной собственности. За поддержку, внимание и помощь автор выражает благодарность Н.Б. Пономареву.

Библиографический список

1. Лебединский Е.В., Мосолов С.В., Калмыков Г.П. Компьютерные модели жидкостных ракетных двигателей. – М.: Машиностроение, 2009. – 376 с.
2. Лебединский Е.В., Калмыков Г.П., Мосолов С.В. Рабочие процессы в жидкостном ракетном двигателе и их моделирование. – М.: Машиностроение, 2008. – 512 с.
3. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом // Труды МАИ, 2016, №91: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=75562>
4. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарного равновесного течения в детонационном двигателе // Труды МАИ, 2015, №83: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=61826>
5. Алемасов В.Е., Дрегаллин А.Ф., Тишин А.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. – М.: ВИНТИ, 1971. – 266 с.
6. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей – Л.: Химия, 1982. – 592 с.

7. Ливанов А.В., Антипенко Э.В. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Реальные газы. Жидкости. Твердые тела. – М.: МГУ, 2006. – 37 с.
8. Алемасов В.Е., Тишин А.П., Дрегалин А.Ф. Теория ракетных двигателей. – М.: Машиностроение, 1989. – 464 с.
9. Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – 533 с.
10. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Дрофа, 2009. – 840с.
11. Назырова Р.Р. Исследование операций в оценке термодинамических характеристик. – Казань, АБАК, 1999. – 198 с.
12. Назырова Р.Р., Пономарев Н.Б. IT-технологии моделирования реальности рабочих тел в процессах жидкостных ракетных двигателей // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 4. С.69–85.