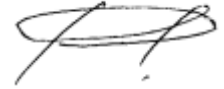


На правах рукописи



Назырова Рузалия Равильевна

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПРОДУКТОВ
СГОРАНИЯ В КАМЕРЕ ЖИДКОСТНОГО РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ
НА ОСНОВЕ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИНЦИПОВ МЕХАНИКИ

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени доктора
физико–математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена в Государственном научном центре Российской Федерации – федеральном государственном унитарном предприятии “Исследовательский центр им. М.В. Келдыша” (ГНЦ ФГУП “Центр Келдыша”)

Официальные оппоненты:

Рухадзе Анри Амвросьевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ФГБУН “Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук”

Бабаков Александр Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, исполняющий обязанности заведующего отделом Информатизации, математического моделирования и управления ФГБУН “Институт автоматизации проектирования Российской академии наук”

Пятницкий Лев Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ФГБУН “Объединенный институт высоких температур”

Ведущая организация: Акционерное общество “Научно-производственное объединение ЭНЕРГОМАШ имени академика В.П. Глушко”

Защита состоится “30” марта 2018 г. в 10-00 часов на заседании диссертационного совета Д212.125.14 при ФГБУВО “Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)” по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д.4 или на сайте МАИ по ссылке:

https://www.mai.ru/defence/doctor/index.php?ELEMENT_ID=85849

Автореферат разослан _____ 2018 г.

Отзывы в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим направлять по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д.4, Ученый совет МАИ.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.125.14
кандидат физико-математических наук, доцент



Гидаспов В.Ю.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Расширение сферы космических интересов, включая изучение и использование природных космических тел (Луна, Марс, Юпитер и его спутники, астероиды, кометы), обуславливает необходимость в существенном увеличении количества запусков и массы космических аппаратов¹ при обеспечении высокой надежности и низкой стоимости средств доставки, удовлетворяющих требованиям низкого уровня экологической опасности (например, разгонных блоков и межорбитальных буксиров). Эффективность решения проблемы изготовления соответствующих ракет–носителей в конечном счете определяет конкурентоспособность государства как на рынке космических услуг, так и на рынке ракетно–космических технологий, а именно, ракетных двигателей (РД) в целом и жидкостных ракетных двигателей (ЖРД) в частности.

Проектирование камеры РД, отвечающей современным требованиям ракетно–космической сферы, невозможно без привлечения компьютерных и информационных технологий², к которым предъявляются требования получения надежных, адекватных исходным положениям фундаментальных теорий, а также результатам экспериментальных исследований, данных. Например, расчеты параметров процессов течения в сопле камеры РД должны производиться посредством поиска минимума энтальпии, что, с одной стороны, соответствует известным положениям классической химической термодинамики, а, с другой стороны, удовлетворяет известным данным о том, что доля скорости потока

$w, \frac{M}{c}$ в удельном импульсе в пустоте $I_{уп}, \frac{M}{c}$ во многих случаях превышает 90%.

Эффективность и надежность вычислений на основе применения известных математических и информационных технологий реализации математиче-

¹ Компьютерные модели жидкостных ракетных двигателей/ Е.В. Лебединский, С.В. Мосолов, Г.П. Калмыков [и др.]; под ред. А.С. Коротева. М., 2009.

² Рабочие процессы в жидкостном ракетном двигателе и их моделирование/ Е.В. Лебединский, Г.П. Калмыков, С.В. Мосолов [и др.]; под ред. А.С. Коротева. М., 2008.

ских моделей обеспечивается, в частности, как на основе формирования наиболее сжатого набора исходных утверждений и данных, так и на фундаменте обоснования сходимости конструируемых последовательностей чисел и оценки достижения решением приемлемой точности.

Бурное развитие компьютерных, информационных и ракетно-космических технологий и конструкций, в частности в направлении существенного увеличения степеней расширения сопел ракетных двигателей верхних ступеней ракет и разгонных блоков с целью повышения удельного импульса тяги, определило актуальность проблемы несоответствия возможностей прежних методов и программ термодинамических расчётов современным потребностям практики. Это обусловило необходимость в разработке новой, усовершенствованной технологии проведения термодинамических расчётов, успешно выполненной автором настоящей работы с привлечением вариационных принципов механики, тесно связанных с термодинамикой с момента ее зарождения.

Степень разработанности темы. Термодинамический расчет параметров продуктов сгорания топлива – многокомпонентной, многофазной смеси реагирующих веществ, участвующих в равновесном процессе течения в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя основывается на решении следующих задач

- вычисление параметров продуктов сгорания топлива в точке торможения на входе в сопло (далее обозначается нижним индексом 0),
- вычисление параметров многокомпонентной смеси реагирующих веществ в минимальном (нижний индекс $*$) и выходном сечениях (нижний индекс a).

Физико-химическая возможность анализа параметров сопла камеры ЖРД термодинамическими методами основывается на введении таких ограничений на процессы в сопле, как

- описание не менее, чем на макроскопическом уровне или игнорирование чрезвычайно малых форм и масс;

- представление стационарности, безотрывности и одномерности течения;
- определение отсутствия или чрезвычайной малости действий и воздействий полей: гравитационного, электростатического, магнитного и эффектов: поверхностного натяжения, броуновского движения, флуктуаций частиц, обуславливающее исчезновение трения и других диссипативных воздействий и ограничение множества геометрических характеристик описания любой многокомпонентной смеси веществ параметром – объем V , (м^3).

Исследование процессов в камере ЖРД в терминологии понятий, аксиом и утверждений термодинамики многокомпонентных смесей веществ определяет справедливость положений

- состояние многокомпонентной смеси веществ в любой момент времени в любом сечении сопла является равновесным и устойчивым,
- взаимодействия многокомпонентной смеси веществ на внешнем (то есть с окружающей средой) и внутреннем уровнях проявляются не более, чем в механической, тепловой и химической формах и не менее, чем на атомном уровне,
- любые процессы, сопровождающие многокомпонентную смесь веществ при течении в сопле камеры ЖРД, являются равновесными и адиабатными,
- вещества в конденсированном состоянии не образуют с веществами в газообразном состоянии растворов,
- вещества в конденсированном состоянии не образуют между собой растворов.

Несмотря на многочисленность подходов и программ термодинамического расчета (Е.В. Самуйлов, Г.В. Белов, Г.К. Моисеев, И.К. Карпов, А.А. Бугаевский, S. Gordon, W.R. Smith, М.М. Китаин, Е.И. Катин, Е.П. Лещенко, А.С. Плешанов), в качестве наиболее известных и признанных в области термодинамических расчетов остаются: в области проектирования РД – методы и средства, разработанные в школах В.Е. Алемасова и Г.Б. Синярева, Б.Г. Трусова; в

энергетике – технологии, акцентирующие внимание на эффективность применения результатов исследований многомерных функций в терминологии трехмерной графики, А.Н. Горбань, Б.М. Кагановича, С.П. Филиппова.

При этом в то время как школа В.Е. Алемасова продемонстрировала вычислительную мощь закона действующих масс, школа Г.Б. Синярева, Б.Г. Трусова обосновала эффективность экстремального подхода для термодинамического расчета. Однако для каждой из этих школ сохранили свою актуальность такие проблемы, как неопределенность

- конечного состава конденсированных фаз,
- возможности существования равновесного состояния, описываемого данной математической моделью и при данных условиях, в принципе,
- полноты, избыточности и непротиворечивости используемого множества формул описания равновесного состояния,
- адекватности результатов расчетов известным физико–химическим положениям.

Более того, сохраняют свою актуальность такие проблемы, как

- разрешимость задач, представляемых как фундамент математических моделей описания равновесных состояний,
- сходимость конструируемых последовательностей точек к решению, обладающему свойством адекватности исходным физико–химическим положениям.

Наибольшую популярность для расчета параметров гетерогенных систем приобрела технология так называемых “больших молекул”, применение которой в окрестности решения вызывает сомнения, что продемонстрировано самими же авторами на основе анализа параметров топливных композиций $O_2 + Be$, $O_2 + Al$.

Несмотря на то, что развитие математики и ее технологий определило введение в решение задачи термодинамического расчета таких новых средств, как методы линейного и нелинейного программирования, сохраняет свою актуальность эффективный, но не лишенный собственных проблем, метод Лагран-

жа–Ньютона решения задач невыпуклого программирования.

В то же время не обращается должное внимание на методы и средства вариационных принципов механики, определивших, благодаря трудам Дж.В. Гиббса, современное состояние химической термодинамики. В частности, расчеты:

- максимума энтропии $S_{B(c)^{(*)}}^{(max)}, \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$, при постоянстве энтальпии H , Дж,
- минимума энтальпии $H_{B(c)^{(*)}}^{(min)}$ при постоянстве энтропии $S, \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$,
- минимума энергии Гиббса $G_{B(c)^{(*)}}^{(min)}$, Дж

в функции температуры $T, \text{К}$ или суммарного числа молей N , моль для разнообразных топлив при различных значениях давления p , Па и составов $B_{(c)}^{(*)} \subseteq B_{(c)}$, где $B_{(c)}$ есть множество конденсируемых веществ и где отношение $B_{(c)}^{(*)} = \emptyset$ идентифицирует гомогенную смесь, результаты которых частично представлены на рисунке 1 для топлива $\text{O}_2 + \text{Be}$ при $\alpha_{ок} = 0,6$ ($\alpha_{ок}$ есть коэффициент избытка окислителя) и на рисунках 2–3 для топлива $\text{O}_2 + \text{РГ} - 1$ при $\alpha_{ок} = 0,4$, привели к выводу: любая из задач термодинамического расчета сопла камеры ЖРД заключается в поиске некоторой миноранты из множества кривых, каждая из которых однозначно соответствует некоторому $B_{(c)}^{(*)}$.

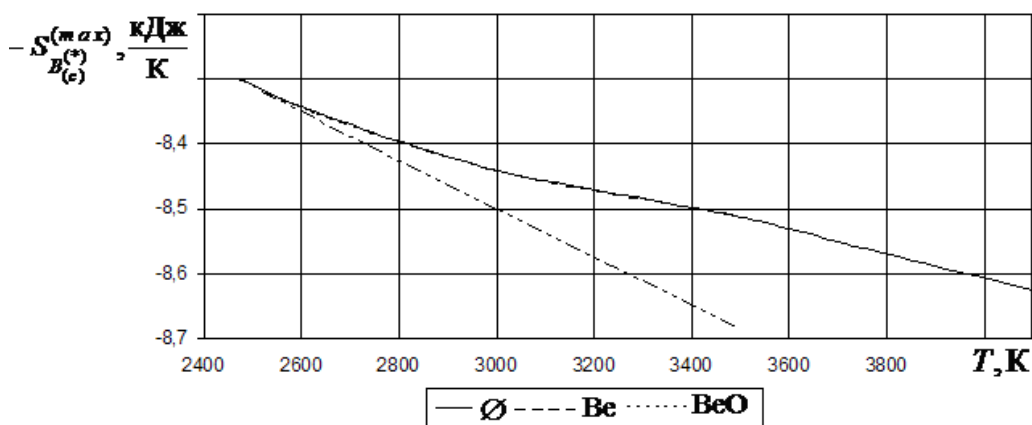


Рисунок 1 – Зависимость $S_{B(c)}^{(max)}$ со знаком минус от T , $p = 50 \text{ МПа}$

Причем в достаточно малой окрестности решения площадь, ограниченная минорантой и осью OT (или ON), минимальна относительно площадей, ограниченных осью OT (или ON) и другими кривыми.

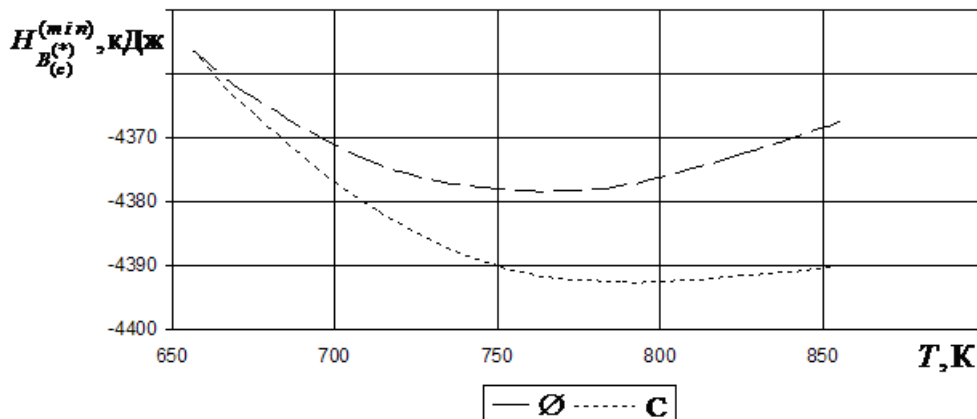


Рисунок 2 – Зависимость $H_{B(c)}^{(min)}$ от T , $p = 1 \text{ кПа}$, $S = 14,122 \frac{\text{кДж}}{\text{К}}$

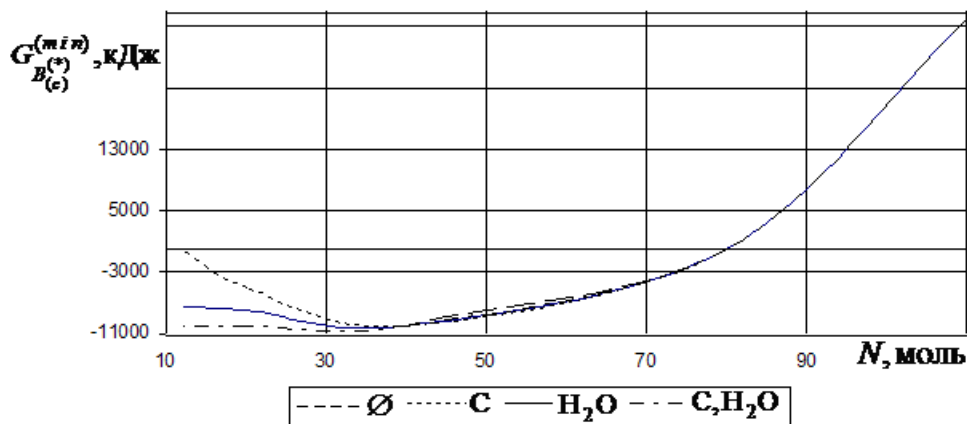


Рисунок 3 – Зависимость $G_{B(c)}^{(min)}$ от N , $p = 15 \text{ МПа}$, $T = 200 \text{ К}$

Таким образом, решение задачи термодинамического расчета параметров многокомпонентной смеси веществ, участвующей в процессе течения в сопле камеры ЖРД, представляется в виде поиска в некоторой области значений параметра π (температур T или суммарных чисел молей N , моль) такой кривой, которая является кривой достижения экстремума интеграла в виде

$$\left\{ \min_{\varphi_{B_k}(\pi)} \int_{\pi_1}^{\pi_1} \psi(\pi, \varphi_{B_k}(\pi), \varphi_{B_k}'(\pi)) d\pi \right\}, \text{ где } \psi(\pi, \varphi_{B_k}(\pi), \varphi_{B_k}'(\pi)) \text{ есть некоторая термодинамическая функция, а } \varphi_{B_k}(\pi) \text{ идентифицирует функцию, описывающую}$$

влияние конденсированных веществ из множества $B_{(c)}^{(*)}$ на термодинамическую функцию в зависимости от параметра π . Очевидно, что применительно к задаче термодинамического расчета параметров многокомпонентных смесей веществ, участвующих в процессе течения в сопле камеры ЖРД, сформулированная задача относится ко множеству задач вариационных принципов механики, где на основе закона постоянства энтропии для адиабатного течения реализуется поиск кривой с наименьшим значением энтальпии, обеспечивающей максимальное значение скорости потока и, как следствие, при ряде дополнительных условий максимальное значение удельного импульса в пустоте.

Отсюда выводится, что задача термодинамического расчета обобщенно

представляется в виде $\min_{\psi} \int_{\pi_1}^{\pi_2} \psi(\pi, \varphi, \varphi') d\pi$, где поиск минимума основывается на

решении дифференциального уравнения Эйлера $\psi_{\varphi} - \frac{d\psi_{\varphi'}}{d\pi} = 0$, где

$\varphi(\pi^{(\min)}) = \varphi^{(\min)}$, $\varphi(\pi^{(\max)}) = \varphi^{(\max)}$. При этом справедливы положения:

- если $\psi = \psi(\pi, \varphi)$ или $\psi = \psi^{(1)}(\pi, \varphi) + \pi' \psi^{(2)}(\pi, \varphi)$, то решение уравнения Эйлера в общем случае не существует;
- если $\psi = \psi(\varphi')$, то в качестве решения уравнения Эйлера выступают прямые линии $\varphi = C_1 \pi + C_2$;
- если $\psi = \psi(\pi, \varphi')$ или $\psi = \psi(\varphi, \varphi')$, то функция $\varphi(\pi)$, являющаяся решением дифференциального уравнения $\psi_{\varphi'}(\pi, \varphi') = C_1$ или $\psi - \psi_{\varphi'}(\varphi, \varphi') = C_1$, представляет кривую, содержащую точку глобального экстремума.

Применительно к рисунку 1 справедливо заключить, что множеству $B_{(c)}^{(*)} = \{\text{BeO}\}$ соответствует прямая, которая содержит точку глобального экстремума только при условии $T \in [2400\text{K}, 3600\text{K}]$. То есть, с одной стороны, миноранта есть прямая линия и экстремум возможно не является глобальным, а, с другой стороны, получение любой точки миноранты с применением метода Ла-

гранжа-Ньютона проблематично.

Итак, переход на решение задач термодинамического расчета параметров многокомпонентных смесей реагирующих веществ, участвующих в процессе течения в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя в терминологии вариационных принципов механики – есть объективно обусловленная актуальная потребность методологии исследований, определяющая создание эффективных интеллектуальных средств разработки конкурентоспособных ЖРД на основе междисциплинарных технологий расчетов, на что в известных работах не обращается внимания.

Цели исследования. Анализ процессов и явлений, сопровождающих течение однородных и многофазных сред в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя, при механических и тепловых воздействиях с целью разработки надежных, приемлемо точных и достаточно скоростных технологий термодинамических расчетов, обеспечивающих, с одной стороны, данными, адекватными известным физико-химическим и математическим теориям, и, с другой стороны, мобильных в плане исследования параметров процессов для различных математических моделей описания состояния веществ и их смесей.

Задачи исследования.

1. Формулирование математических моделей равновесных состояний и процессов течения в сопле камеры ЖРД на основе вариационных принципов механики.
2. Определение свойств множеств, функций и задач, представляющих математические модели.
3. Разработка эффективных математических технологий вычислений, реализующих сформулированные математические модели.
4. Исследование параметров газожидкостных потоков в процессе течения в сопле камеры ЖРД для различных математических моделей состояния смесей веществ.

Научная новизна. Получены оригинальные, научно обоснованные решения, внедрение которых вносит значительный вклад в ускорение науч-

но–технического прогресса:

1. Сформулировано, что фундаментальную основу термодинамического расчёта параметров реагирующих смесей веществ, участвующих в процессе течения в сопле камеры ЖРД, составляют вариационные принципы механики.
2. Определено, что известные классические постановки задач термодинамического расчета при учете уравнения состояния реального газа получаются при подстановке в соответствующие обобщенные задачи результатов осреднения интегралов.
3. Постулировано, что фундамент термодинамического расчета параметров реагирующих систем, находящихся в некотором равновесном состоянии, описываемом давлением и энтальпией или энтропией, образует поиск температуры, принадлежащей достаточно малой окрестности решения, с помощью в том числе и известных соотношений аналитической геометрии, и методов выпуклого программирования, обеспечивающих решение задач вариационных принципов механики поиска миноранты.
4. Обосновано, что базисной основой термодинамического расчета параметров реагирующих систем веществ, находящихся в равновесном состоянии, описываемом давлением и температурой, является суперпозиция ряда методов, наиболее значимыми из которых являются метод условного градиента, метод неопределенных множителей Лагранжа и метод Ньютона, обеспечивающих при комплексном применении приемлемую надежность и достаточно высокую скорость вычислений, а также адекватность результатов расчетов исходным физико–химическим положениям за счет применения оригинальных формул оценок достижения окрестности решения.
5. Показано, что для любых допустимых давлений и температур существуют такие окрестности решения, где состав реагирующей смеси веществ остается с приемлемой точностью постоянным; это позволяет существенно упростить расчет параметров систем при фазовых или полиморфных переходах, а также отказаться от организации итерационных процессов, например, при поиске давления при заданных температуре и энтропии, за счет применения оригинальных

формул вычислений.

б. Продемонстрирована теоретическая разработка и практическая реализация сформулированных и обоснованных идей в программах термодинамических расчётов для различных математических моделей смесей веществ.

Теоретическая и практическая значимость работы. Сформулированы следующие методологические положения.

1. Соблюдение положений химической термодинамики об эквивалентности множества термодинамических функций, для которых реализуется поиск экстремума, множеству равновесных состояний есть фундаментальная основа термодинамического расчета параметров продуктов сгорания при течении в сопле камеры ЖРД.

2. Значение линейной формы энтропии составляет не менее 94% от значения энтропии в целом; линейная форма энтропии характеризуется фундаментальной значимостью.

3. Корректный выбор математических технологий решений при использовании сжатого набора утверждений и данных обеспечивает справедливость ряда, не упомянутых в модели положений термодинамики.

Разработаны программно–информационные системы, по которым получено шесть Свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ и которые позволяют определять термодинамические и теплофизические свойства многокомпонентных смесей веществ. Динамически подключаемая библиотека STDsoft – корневой сегмент программно–информационных систем

- интегрирована в программные комплексы Отраслевой методики определения удельного импульса тяги ЖРД, разработанные ГНЦ ФГУП “Центр Келдыша” и постоянно использующиеся в ходе многочисленных расчётов удельного импульса тяги различных ЖРД,

- использована при решении задач расчета параметров сопла и удельного импульса тяги камеры ЖРД с целью профилирования и оптимизации сопла, а также при работе над созданием соответствующих отраслевых материалов по определению энергетических характеристик ЖРД.

Результаты работы использованы научно–исследовательской и учебной работах КГТУ им. А.Н. Туполева и КГЭУ. Работа выполнялась: в 1996–1997 годах в соответствии с Федеральной космической программой России на 1996–1997 годах (государственный контракт № 100–3/032–96 от 01.07.96 “Трехкомпонентный ЖРД”) и при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований – грант № 93–02–15754, в 2006–2015 годах по договорам с ГНЦ ФГУП “Центр Келдыша” в рамках НИР «Двигатель» Федеральной космической программы России на 2006–2015 годах (Государственные контракты № 251–0214/06, № 251–0214/09, № 251–0214/12).

Методология и методы исследования. Методологическую основу составляет междисциплинарный поиск решения задач термодинамического расчета параметров сопла камеры ЖРД на фундаменте применения систем знаний теории ракетных двигателей, термодинамики (классической, химической, технической), механики жидкости и газа, математического и функционального анализа, теории выпуклого и невыпуклого программирования, теории вариационного исчисления. Для аналитических, численных и информационных исследований применены методы математического моделирования, математического и функционального анализа, численные методы решения экстремальных задач и систем линейных и нелинейных уравнений, методы конструирования объектно–ориентированных программных компонентов.

Положения, выносимые на защиту.

1. Математические модели равновесных состояний термодинамических систем, применяемые для расчётных исследований процессов течения в соплах камер сгорания ЖРД, а также их фундаментальные свойства.
2. Условия разрешимости задач и сходимости конструируемых последовательностей точек, оценки достижения достаточно малых окрестностей точных решений, адекватных исходным физико–химическим положениям.
3. Результаты оценки эффективности разработанных технологий вычислений.
4. Данные численных исследований экстремальных значений, а также пара-

метров процесса течения продуктов сгорания в сопле камеры ЖРД для различных математических моделей смесей веществ.

Степень достоверности. Применение известных положений теории ракетных двигателей, фундаментальных положений физико–химических и математических теорий, использование банка данных ИВТАНТЕРМО, совпадение результатов расчетов с приемлемой точностью с данными всемирно признанного 10-томного справочного издания “ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ”, полученными без привлечения метода “больших молекул”, обуславливают достаточно высокий уровень достоверности результатов теоретических и практических исследований.

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы докладывались и получали положительную оценку на семинарах КГУ им. В.И. Ульянова–Ленина, КГТУ им. А.Н. Туполева, МГУ им. М.В. Ломоносова, ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, ОИВТ РАН, ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша» и 24 конференциях республиканского, российского, всесоюзного и международного (12) уровней, в том числе: 4th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 2–6 June, 1997, Brussels, Belgium, 15th International CODATA Conference Scientific Data in the Age of Networking, 29 September. –3 October, 1996, Tsukuba, Japan, IV Международная конференция Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике, 3–7 июля, 1995, Казань, Россия, International Conference on Combustion, Moscow – St.–Petersburg, 21–26 June, 1993, Национальная конференция по теплоэнергетике НКТЭ–2006, 4–8 сентября, 2006, Казань, Россия, Международная конференция, посвященная девяностолетию со дня рождения Л.С. Понтрягина, 31 августа – 6 сентября, 1998, Москва, Россия, Международная научная конференция, посвященная 90–летию со дня рождения Г.Г. Тумашева, 21–24 ноября, 2000, Казань, Россия, Международная научная конференция, посвященная 200–летию Казанского университета, 18–24 марта, 2002, Казань, Россия, Всероссийская научно–техническая конференция “Ракетно–космические двигательные установки”, посвященная

65–летию со дня основания кафедры “Ракетные двигатели” МГТУ им. Н.Э. Баумана, 23–24 октября, 2013, Москва, Россия.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Общий объем работы 283 страниц, 190 рисунков на страницах и по тексту, 33 таблиц по тексту, список литературы на 18 страницах, включающий 177 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении. Представлены актуальность темы исследований и степень ее разработанности, описаны цели, задачи исследований и научная новизна работы, указаны теоретическая, практическая значимость работы и методология, методы исследования, определены положения, выносимые на защиту, а также степень достоверности и апробация результатов исследований.

Благодарности. Автор посвящает работу своей маме Назыровой М.Х. За профессионализм и неоценимую помощь автор определяет признательность и благодарит Пономарева Н.Б. За неподдельное внимание и поддержку автор выражает светлую память безвременно ушедшим Трусову Б.Г., Самуйлову Е.В., Лосеву С.А., Кожевникову Ю.В., Тунакову А.П. За помощь и ценные советы автор благодарит Мосолова С.В., Тишина А.П., Елизарова А.М., Лозино-Лозинскую И.Г., Исакова Д.В., Пономарева А.А., Хамидуллина Р.А., Звереву О.Г., Нуруллову Р.Р., Лахтину Н.Н., Фигурову М.Д., Ефимову К.С., Халикову Л.Н., Хузину Г.М., Рябову Л.А., учеников Новикова Д.Г., Назырова Р.Р., а также работников библиотеки КГТУ им. А.Н.Туполева.

В главе первой определено, что термодинамический расчет параметров процесса течения в камере сгорания ЖРД многокомпонентной, многофазной смеси реагирующих веществ при учете представленных ранее ограничений основывается на построении математических моделей

- для точки торможения на входе в сопло камеры ЖРД, для которой определяется завершение процесса горения при давлении p_0 топлива с эн-

тальпией H_0 , что позволяет определить корректность применения математической модели для равновесного состояния $p_0, H_0 = const$,

- для любого сечения сопла камеры ЖРД, рассматриваемого как точка завершения процесса течения при $S_0 = const$ до заданного давления p_a , что приводит к выводу о справедливости использования математической модели для равновесного состояния $p_a, S_0 = const$.

Фундаментальную основу термодинамических исследований составляет равновесное состояние $p_0, T_0 = const$, которое с физической точки зрения соответствует точке завершения процесса нагрева.

Сформулированы математические модели равновесных состояний, постулированы и обоснованы свойства множеств, функций и задач, построены таблицы конечных разностей и представлены системы уравнений расчета параметров процесса течения в сопле камеры ЖРД при известных газодинамических характеристиках.

1. Множество X элементов X_i химической формулы $X_{1b_1} \dots X_{mb_m}$, где X_i – символ химического элемента и где b_i – количество грамм–атомов химического элемента X_i , условной молекулы топлива однозначно определяет множество индивидуальных веществ B . Для каждого элемента j множества B термодинамические свойства: $H_j^{(0)}(T)$ (энтальпия), $S_j^{(0)}(T)$ (энтропия), $Cp_j^{(0)}(T)$ (теплоемкость при $p = const$) представляют вещество j как уникальную материальную субстанцию на промежутке температур $[T_j, \bar{T}_j]$ существования.

2. Множество конденсируемых веществ $B_{(c)} \subset B$ разбивается на множество упорядоченных подмножеств Γ_j , каждому из которых соответствует некоторый элемент множества $B_{(g)}^{(\Gamma)} \subseteq B_{(g)}$, где $B_{(g)}$ есть множество газообразных веществ; для множества $B_{(g)}^{(\Gamma)}$ определено, что оно включает как существующие, так и условно существующие при данной температуре газообразные вещества. Некоторое вещество является условно существующим при некоторой фиксирован-

ной температуре, принадлежащей исследуемому интервалу температур $[\underline{T}, \bar{T}]$, если при данной температуре его свойства не определены, а в промежутке $[\underline{T}, \bar{T}]$ существует, по крайней мере одна, температура, при которой свойства данного вещества известны. Упорядоченное множество веществ Γ_j описывается такими параметрами, как число молей конденсируемого вещества $n_j^{(\Gamma)}$, где

$n_j^{(\Gamma)} = \sum_{k \in \Gamma_j} n_k$, и интервал $[\underline{T}_j^{(\Gamma)}, \bar{T}_j^{(\Gamma)}]$ температурного существования конден-

сируемого вещества, где $\underline{T}_j^{(\Gamma)} = \min_{k \in \Gamma_j} \underline{T}_k$, $\bar{T}_j^{(\Gamma)} = \max_{k \in \Gamma_j} \bar{T}_k$ и где для любого

$j \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$ справедливо включение $[\underline{T}_j, \bar{T}_j] \supseteq [\underline{T}_j^{(\Gamma)}, \bar{T}_j^{(\Gamma)}]$.

3. Для любой материальной субстанции в газообразном состоянии справедливо либо уравнение состояния идеального газа

$$pV = R_0 T N, \quad (1)$$

где $R_0, \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ есть универсальная газовая постоянная, либо уравнение состояния реального газа

$$pV = R_0 T N \left(1 + \frac{BN}{V} \right), \quad (2)$$

где для вириального коэффициента справедливо определение $B = \sum_{j \in B_{(g)}} x_j B_j$,

$$B_j = \sum_{k \in B_{(g)}} x_k B_{jk}.$$

4. В любой момент времени термодинамической системе соответствует одна и только одна точка \bar{n} замкнутого и ограниченного пространства $\aleph = \{\bar{n} | \bar{n} = (N, \dots, x_j, \dots, n_k, \dots)\}$, где $x_j \in [0, 1]$ есть мольная доля вещества $j \in B_{(g)}$, а $n_k \in [0, n^{(\max)}]$ – число молей вещества $k \in B_{(c)}$, возможных составов

смеси веществ. Для любого $j \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$ и $k \in \Gamma_j$ при представлении

$\tau_{jk}(p, T, \bar{n}) = \bar{\mu}_k(T) - \bar{\mu}_j(p, T, \bar{n})$, где $\bar{\mu}_l$ есть химический потенциал вещества

$l \in B$, для равновесного состояния термодинамической системы справедливо

$$\text{определение } \ln x_j \begin{cases} \leq \tau_{jk}(p, T, \bar{n}) \text{ при } n_j^{(\Gamma)} = 0, \\ = \tau_{jk}(p, T, \bar{n}) \text{ при } n_j^{(\Gamma)} > 0. \end{cases}$$

5. Термодинамическая система описывается термодинамическими функциями, определяемыми при учете (1) в виде

$$H(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B(g)} x_j H_j(T) + \sum_{j \in B(c)} n_j H_j(T), \quad (3)$$

$$S(p, T, \bar{n}) = N \sum_{j \in B(g)} x_j S_j(p, T, \bar{n}) + \sum_{j \in B(c)} n_j S_j(T) \quad (4)$$

или при учете (2) в форме

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

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

где при $\alpha_j(p, T, \bar{n}) = B(p, T, \bar{n}) - 2B_j(p, T, \bar{n})$ для любого $j \in B(g)$ справедливы выражения

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

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

Итак, справедливо для энергии Гиббса представить формальное определение

$$\bar{G}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = \bar{H}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) + \bar{S}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}), \quad (7)$$

где форма "(r)" вместо "(δ)" применяется при учете (2) и где

$$\bar{G}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = \frac{G^{(\delta)}(p, T, \bar{n})}{TR_0}, \quad \bar{H}^{(\delta)}(p, T, \bar{n}) = \frac{H^{(\delta)}(p, T, \bar{n})}{TR_0},$$

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

6. Математические модели равновесных состояний распределяются на классические и вариационные.

- Равновесное состояние $p_0, H_0 = const$. Классическая математическая модель представляется в виде

$$\max_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{n} \in \aleph} S^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) \quad (8)$$

при справедливости системы уравнений

$$\sum_{j \in B(g)} x_j = 1, \quad (9)$$

$$N \sum_{j \in B(g)} a_{ij} x_j + \sum_{j \in B(c)} a_{ij} n_j = b_i, \quad i \in X, \quad (10)$$

$$H^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) = H_0. \quad (11)$$

Вариационная математическая модель при учете уравнения состояния идеального газа определяется в форме

$$\min_{\bar{S} \in \{ \bar{S}_{B(c)^*} \}} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \bar{S}(p_0, T, \bar{q}) dT, \quad (12)$$

где для любого фиксированного состава множества $B_{(c)}^{(*)}$ формирование кривой $\bar{S}_{B(c)^*}$ реализуется на основе решения задачи (8)–(11).

- Равновесное состояние $p_0, S_0 = const$. Классическая математическая модель представляется в виде

$$\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{n} \in \aleph} H^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) \quad (13)$$

при справедливости системы уравнений (9)–(10) и уравнения

$$S^{(\delta)}(p_0, T, \bar{n}) = S_0. \quad (14)$$

Вариационная математическая модель при учете уравнения состояния идеального газа определяется в форме

$$\min_{H \in \{ H_{B(c)^*} \}} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} H(p_0, T, \bar{q}) dT, \quad (15)$$

где для любого фиксированного состава множества $B_{(c)}^{(*)}$ формирование кривой

$H_{B(c)}^{(*)}$ реализуется на основе решения задачи (13), (9)–(10),(14).

- Равновесное состояние $p_0, T_0 = const$. Классическая математическая модель представляется в виде

$$\min_{n \in \aleph} \bar{G}^{(\delta)}(p_0, T_0, \bar{n}) \quad (16)$$

при справедливости системы уравнений (9)–(10). Вариационная математическая модель при учете уравнения состояния идеального газа определяется в форме

$$\bar{G} \in \left\{ \bar{G}_{B(c)}^{(*)} \right\}_{N_{\min}}^{N_{\max}} \int \bar{G}(p_0, T, \bar{q}) dN, \quad (17)$$

где для любого фиксированного состава множества $B(c)^{(*)}$ формирование кривой $\bar{G}_{B(c)}^{(*)}$ реализуется на основе решения задачи (16), (9)–(10).

9. Множество $\aleph^{(0)} \subseteq \aleph$, для каждой точки которого справедлива система уравнений (9)–(10), является полным и компактным. Множество $Q^{(0)} \subseteq Q = \{ \bar{q} \mid \bar{q} = (N, \dots, \nu_j, \dots, n_k, \dots) \}$, где $\nu_j = Nx_j$ для любого $j \in B(g)$ и где для любого $\bar{q} \in Q^{(0)}$ справедлива система линейных уравнений

$$\sum_{j \in B(g)} \nu_j - N = 0, \quad (18)$$

$$\sum_{j \in B(g)} a_{ij} \nu_j + \sum_{j \in B(c)} a_{ij} n_j = b_i, \quad i \in X, \quad (19)$$

выпукло и эквивалентно множеству $\aleph^{(0)}$.

11. Для любых допустимых p функции $H(p, T, \bar{n})$, $S(p, T, \bar{n})$ и $G(p, T, \bar{n})$ непрерывны на множестве $[\underline{T}, \bar{T}] \times Q^{(0)}$ и достигают на этом множестве своих наибольших и наименьших значений. Для любых постоянных p, T они дифференцируемы по Фреше на множестве Q , причем

- $\Delta H(p, T, \bar{q}) = \langle \bar{\Delta}, \text{grad} H(p, T, \bar{q}) \rangle$ и для любых $\bar{q}^{(0)}, \bar{q} \in Q$ выполнено:

$$\left\langle \text{grad} H(p, T, \bar{q}), \bar{q} - \bar{q}^{(0)} \right\rangle = H(p, T, \bar{q}) - H(p, T, \bar{q}^{(0)}),$$

- $\Delta S(p, T, \bar{q}) = \left\langle \bar{\Delta}, \text{grad} S(p, T, \bar{q}) \right\rangle + \omega(\bar{q}, \bar{\Delta})$, где $\omega(\bar{q}, \bar{\Delta}) \xrightarrow{\|\bar{\Delta}\| \rightarrow 0} 0$, при

$$S(p, T, \bar{q}) = S_{(L)}(p, T, \bar{q}) + \psi_S(p, T, \bar{q}) \text{ и } \psi_S(p, T, \bar{q}) = -R_0 \sum_{j \in B_{(g)}} \nu_j [\ln \nu_j - \ln N], \text{ где}$$

$$S_{(L)}(p, T, \bar{q}) = \sum_{j \in B_{(g)}} \nu_j S_j(p, T) + \sum_{k \in B_{(c)}} n_k S_k(T), \text{ и для любых } \bar{q}^{(0)}, \bar{q} \in Q \text{ выполнены}$$

равенство $\left\langle \text{grad} S(p, T, \bar{q}), \bar{q} \right\rangle = S(p, T, \bar{q})$ и равенство

$$\left\langle \text{grad} S_{(L)}(p, T, \bar{q}), \bar{q} - \bar{q}^{(0)} \right\rangle = S_{(L)}(p, T, \bar{q}) - S_{(L)}(p, T, \bar{q}^{(0)}),$$

- для любого $\bar{q} \in Q$ справедливо $\left\langle \text{grad} G(p, T, \bar{q}), \bar{q} \right\rangle = G(p, T, \bar{q})$.

13. При учете (1) экстремальные задачи классических математических моделей эквивалентны, соответственно, задачам

$$\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{q} \in Q_{H_0}} \bar{S}(p_0, T, \bar{q}), \quad (20)$$

$$\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{q} \in Q_{S_0}} H(p_0, T, \bar{q}), \quad (21)$$

$$\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} \bar{G}(p_0, T_0, \bar{q}), \quad (22)$$

где $Q_{H_0} = \{\bar{q} \mid \bar{q} \in Q^{(0)}, H(p_0, T, \bar{q}) = H_0\}$, $Q_{S_0} = \{\bar{q} \mid \bar{q} \in Q^{(0)}, S(p_0, T, \bar{q}) = S_0\}$.

14. Основные особенности задачи (20).

- Преобразуется к эквивалентному виду $\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}]} \bar{S}^{(1)}(p_0, T, \bar{q})$, где для

любых фиксированных $T \in [\underline{T}, \bar{T}]$ и $B_{(c)}^*$ задача $\bar{S}^{(1)}(p_0, T, \bar{q}) = \min_{\bar{q} \in Q_{H_0}} \bar{S}(p_0, T, \bar{q})$

относится ко множеству задач выпуклого программирования.

- Имеет решение, если справедливо отношение $Q^{(0)} \neq \emptyset$ и разрешимо уравнение

$$H(p_0, T, \bar{q}) = H_0, \bar{q} \in Q^{(0)}, \quad (23)$$

то есть выполнено условие $\min_{q \in Q^{(0)}} H(p_0, T, \bar{q}) \leq H_0 \leq \max_{q \in Q^{(0)}} H(p_0, T, \bar{q})$.

- Точка $\bar{q}^{(*)} \in Q^{(0)}$ есть решение задачи (20), если справедливо $\left\langle \text{grad } \bar{S}(p_0, T, \bar{q}^{(*)}), \bar{q} - \bar{q}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon_{\bar{S}}$ для любого \bar{q} из окрестности $\Omega_{\varepsilon}(T^{(*)}, \bar{q}^{(*)}) \subseteq Q_{H_0}$.

- Существуют такие ε , для которых задача либо приобретает свойства задач выпуклого или линейного программирования, либо становится эквивалентной задаче решения уравнения (23), где \bar{q} есть решение (22).

15. Основные особенности задачи (21).

- Преобразуется к эквивалентному виду $\min_{T \in [T, \bar{T}]} H^{(1)}(p_0, T, \bar{q})$, где

$$H^{(1)}(p_0, T, \bar{q}) = \min_{q \in Q_{S_0}} H(p_0, T, \bar{q}).$$

- Имеет решение, если справедливо отношение $Q^{(0)} \neq \emptyset$ и разрешимо уравнение

$$S(p_0, T, \bar{q}) = S_0, \quad \bar{q} \in Q^{(0)}, \quad (24)$$

то есть выполнено условие $S_0 \in [\underline{\gamma}_S(p_0, T), \bar{\gamma}_S(p_0, T) + \gamma_S]$, где

$$\underline{\gamma}_S(p_0, T) = \min_{q \in Q^{(0)}} S_{(L)}(p_0, T, \bar{q}), \quad \bar{\gamma}_S(p_0, T) = \max_{q \in Q^{(0)}} S_{(L)}(p_0, T, \bar{q}).$$

- Точка $\bar{q}^{(*)} \in Q^{(0)}$ есть решение задачи, если справедливо $\left\langle \text{grad } H(p_0, T, \bar{q}^{(*)}), \bar{q} - \bar{q}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon_H$ для любого \bar{q} из окрестности $\Omega_{\varepsilon}(T^{(*)}, \bar{q}^{(*)}) \subseteq Q_{S_0}$.

- Существуют такие ε , что задача либо приобретает свойства задач выпуклого или линейного программирования, либо становится эквивалентной задаче решения уравнения (24), где \bar{q} есть решение (22).

16. Основные особенности задачи (22).

- Для любого фиксированного $B_{(c)}^{(*)}$ является задачей выпуклого программирования.

- Имеет решение, если $Q^{(0)} \neq \emptyset$, то есть система уравнений (18)–(19), принадлежащая к классу задач линейного программирования, имеет решение.

- Точка $\bar{q}^{(*)} \in Q^{(0)}$ есть решение задачи, если для любого $\bar{q} \in \Omega_\varepsilon(\bar{q}^{(*)})$ справедливо неравенство

$$\left\langle \text{grad} \bar{G}(p_0, T_0, \bar{q}^{(*)}), \bar{q} - \bar{q}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon \bar{G}. \quad (25)$$

- Существуют такие ε , для которых задача приобретает свойства задач линейного программирования.

17. Семейство конечных разностей, представленное в таблице 1, построено при учете определений приращений параметров состава в виде:

$$\Delta n_k = (n_k)'_\varphi \Delta \varphi, \quad k \in B_{(c)}, \quad \Delta N(\Delta \varphi) = N'_\varphi \Delta \varphi \quad \text{и} \quad \Delta x_j(\Delta \varphi) = (x_j)'_\varphi \Delta \varphi, \quad j \in B_{(g)}.$$

Использование таблицы 1 обуславливает

- получение формальных выражений для приращений функций по T при $p = \text{const}$ в форме полиномов третьей степени вида

$$\Delta H_p(\Delta T) = (\Delta T_p) C_p + (\Delta T_p)^2 \xi_{H,p}^{(2)} + (\Delta T_p)^3 \xi_{H,p}^{(3)},$$

$$\Delta S_p(\Delta T) = (\Delta T_p) \frac{C_p}{T} + (\Delta T_p)^2 \xi_{S,p}^{(2)} + (\Delta T_p)^3 \xi_{S,p}^{(3)},$$

где $C_p, \frac{D\mathcal{J}}{K}$ – теплоемкость при $p = \text{const}$, $\xi_{H,p}^{(2)}, \xi_{H,p}^{(3)}, \xi_{S,p}^{(2)}, \xi_{S,p}^{(3)}$ – некоторые коэффициенты,

- вывод инвариантов: $(1 - \beta_T p)H + H^{(p)} + pV(\alpha_p T - 1) = 0$,

$$(1 - \beta_T p)S + S^{(p)} + \frac{pV(\alpha_p T - 1)}{T} = 0, \quad C_{p_f} - C_p + (\alpha_p T - 1)S + S^{(T)} = 0,$$

где $C_{p_f}, \frac{D\mathcal{J}}{K}$ – теплоемкость замороженной смеси при $p = \text{const}$,

$$\alpha_p T = \frac{T}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p, \quad \beta_T p = -\frac{p}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad H^{(p)}, S^{(p)}, H^{(T)}, S^{(T)} - \text{суммы частных}$$

производных по давлению и температуре специальной структуры.

Таблица 1 – Семейство конечных разностей

| | $p = const$ | $T = const$ | $S = const$ | $H = const$ |
|------------|---|---|--|--|
| Δp | 0 | ε | ε | ε |
| ΔT | ε | 0 | $\frac{\alpha_p T V}{C_p}$ | $\frac{V(\alpha_p T - 1)}{C_p}$ |
| ΔS | $\varepsilon \frac{C_p}{T} + \varepsilon^2 \xi_{S,p}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{S,p}^{(3)}$ | $\varepsilon(-\alpha_p V) + \varepsilon^2 \times \xi_{S,T}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{S,T}^{(3)}$ | $\varepsilon^2 \xi_{S,S}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{S,S}^{(3)}$ | $-\varepsilon \frac{V}{T} + \varepsilon^2 \xi_{S,I}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{S,I}^{(3)}$ |
| ΔH | $\varepsilon C_p + \varepsilon^2 \xi_{H,p}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{H,p}^{(3)}$ | $\varepsilon V(1 - \alpha_p T) + \varepsilon^2 \xi_{H,T}^{(2)}$ | $\varepsilon \frac{C_v \beta_T p V}{C_p} + \varepsilon^2 \times \xi_{U,S}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{U,S}^{(3)}$ | $\varepsilon \frac{V}{C_p} [\alpha_p p V + \beta_T p C_v - C_p] + \varepsilon^2 \xi_{U,H}^{(2)} + \varepsilon^3 \xi_{U,H}^{(3)}$ |

18. Применение осредненной технологии вычисления интегралов

$\int_0^p \psi(p) dp = p \psi(p)$ обусловливает справедливость выражений:

$$A_H = pN(B - B^{(+)}), \quad V^{(r)} = V + NB, \quad A_G = pNB, \quad A_S = -\frac{pNB^{(+)}}{T},$$

$A_H = pN(B - B^{(+)})$ и, как следствие, с учетом (5)–(7) для реагирующих систем приводит к формулам

$$[\alpha_p T]^{(r)} = [\alpha_p T] - \left(1 - \frac{R_0 T N}{p V^{(r)}} \right) \left[1 - \frac{2B^{(T)} + B^{(+)}}{B} \right],$$

$$[\beta_T p]^{(r)} = [\beta_T p] - \left(1 - \frac{R_0 T N}{p V^{(r)}} \right) \left[1 + \frac{2B^{(p)}}{B} \right],$$

$$C_p^{(r)} = C_{p_f}^{(r)} + (C_p - C_{p_f}) + \frac{\alpha_p T - 1}{T} A_H + 2pN(B^{(T)} - B^{(+,T)}),$$

где $B^{(+)}$, $B^{(T)}$, $B^{(p)}$, $B^{(+,T)}$, $B^{(+,+)}$ есть суммы частных производных от B по давлению и температуре специальной структуры. Более того, применение осредненной технологии для замороженных систем позволяет получить выражения

$$\left[\alpha_p T\right]_f^{(r)} = 1 - \left(1 - \frac{R_0 T N}{p V^{(r)}}\right) \left[1 - \frac{B^{(+)}}{B}\right], \quad \left[\beta_T p\right]_f^{(r)} = \frac{R_0 T N}{p V^{(r)}},$$

$$C_{p_f}^{(r)} = C_{p_f} + \frac{p N}{T} \left[B^{(+)} - B^{(+,+)}\right].$$

19. Термодинамический расчет параметров процесса течения в сопле камеры ЖРД основывается на решении уравнения $\psi_{S_0}(p, T^{(*)}) = \psi^{(0)}$, где ψ представляет некоторую газодинамическую характеристику, например, число Маха M или геометрическую степень расширения сопла \bar{F} , а $T^{(*)}$ есть решение задачи (15). При этом

$$\left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial p}\right)_S = \frac{\bar{F}}{p} \left\{ \frac{p}{\rho w^2} - \frac{p}{\rho a^2} \right\} = \frac{\bar{F}}{\rho w^2} \left(1 - \frac{w^2}{a^2}\right) = \frac{\bar{F} f}{w} (1 - M^2) = \frac{\bar{F}^2}{w} f_* (1 - M^2),$$

$$\left(\frac{\partial M}{\partial p}\right)_S = -\frac{M}{\rho w^2} - \frac{M}{2p} \left\{ \chi - \beta_T p \left[1 + \frac{(\chi - 1)^2}{\chi \alpha_p T}\right] \right\},$$

где $a = \sqrt{\frac{\chi p}{\rho [\beta_T p]}}$, $\frac{m}{c}$ — есть наиболее эффективное соотношения представления

скорости звука, $\rho = \frac{m_T}{V}$, $\frac{кг}{м^3}$ — плотность и $\chi = \frac{C_p}{C_v}$ — коэффициент адиабаты,

C_v , $\frac{Дж}{К}$ — теплоемкость при $V = const$, $f = \frac{1}{\rho w}$, $\frac{м^2 \cdot c}{кг}$ — удельная площадь.

Вторая глава посвящена описанию применяемых математических методов решения задач в терминологии вариационных принципов механики и обоснованию эффективности их использования.

1. Термодинамические свойства любого вещества есть непрерывные и дифференцируемые функции, что обеспечивается для условно существующих веществ расширением области существования энергии Гиббса с помощью опре-

деления в качестве ее значения чрезвычайно большого по модулю числа $\phi_j^{(G)}(T)$, что, например, представлено на рисунке 4, обеспечивающего равенство $x_j = 0$ для любого $T \in [\bar{T}_j, \bar{T}] \subseteq [\underline{T}, \bar{T}]$.

2. Экстремальная задача (22) поиска минимума приведенной энергии Гиббса решается при условии определенности состава множества конденсируемых веществ $B_{(c)}^{(*)}$ с помощью метода неопределенных множителей Лагранжа поиска экстремума многомерной функции, метода Ньютона решения системы нелинейных уравнений, метода условного градиента поиска минимума выпуклой функции, симплекс-метода вычисления минимума линейной формы, метода Зейделя решения системы линейных уравнений, метода Ньютона и метода половинного деления решения уравнения одного переменного, метода касательных и метода золотого сечения поиска минимума одномерной выпуклой функции.

3. Решение задачи (22) методом неопределенных множителей Лагранжа основывается на выполнении следующих действий.

- Формирование векторного уравнения

$$\bar{f}(\bar{\sigma}) = 0, \quad (26)$$

где $\bar{\sigma} \in \Sigma$ и $\Sigma = \{\bar{\sigma} \mid \bar{\sigma} = (\lambda_0, \bar{h}), \lambda_0 \in [\underline{\lambda}_0, \bar{\lambda}_0], \bar{h} \in H\}$, $x_j \in [0,1]$, $j \in B_{(g)}$, $\bar{N} = \frac{1}{N}$, $\bar{n}_k = \frac{n_k}{N}$, $k \in B_{(c)}^{(*)}$, при $H = \{\bar{h} \mid \bar{h} = (\ln \bar{N}, \dots, \ln x_j, \dots, \bar{n}_k, \dots)\}$, причем $\Gamma_j \subseteq B_{(c)}^{(*)}$ для

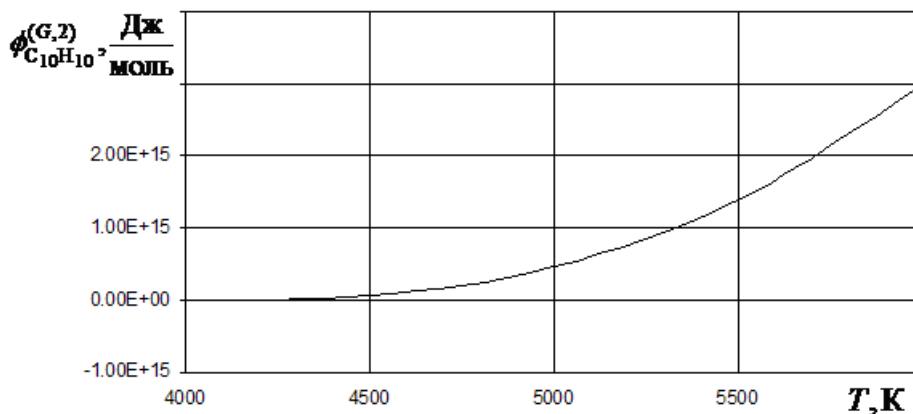


Рисунок 4 – Зависимость $\phi_{C_{10}H_{10}}^{(G,2)}$ от T , $p = 100$ кПа

любого $j \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$ и Σ эквивалентно $\mathfrak{S} = \{\bar{\chi} \mid \bar{\chi} = (\lambda_0, \bar{q}), \lambda_0 \in [\underline{\lambda}_0, \bar{\lambda}_0], \bar{q} \in Q\}$, и где координаты вектора $\bar{f}(\bar{\sigma}) = (f_0(\bar{\sigma}), f_{\bar{N}}(\bar{\sigma}), \dots, f_j(\bar{\sigma}), \dots, f_{kl}(\bar{\sigma}), \dots)$, $j \in B_{(g)}$, $k \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$, $l \in \Gamma_k$ имеют вид $f_0(\bar{\sigma}) = \omega_0(\bar{\chi})$, $f_j(\bar{\sigma}) = \omega_j(\bar{\chi})$, $j \in M_{(g)}$, $f_{jk}(\bar{\sigma}) = \omega_{jk}(\bar{\chi})$, $k \in \Gamma_j$, $j \in M_{(g)}^{(\Gamma)}$, $f_{il}(\bar{\sigma}) = \omega_{il}(\bar{\chi})$, $i \in A_{(g)}^{(\Gamma)}$, $l \in \Gamma_i$, $f_N(\bar{\sigma}) = \frac{\varphi(\bar{q})}{N}$, $f_i(\bar{\sigma}) = \varphi_i(\bar{q})$, $i \in A_{(g)}^{(0)}$, $f_i(\bar{\sigma}) = \varphi_i(\bar{q})$, $i \in A_{(g)}^{(\Gamma)}$, при определении

$$\omega_0(\bar{\chi}) = \lambda_0 + 1, \quad \omega_{jk}(\bar{\chi}) = - \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} a_{ij} \ln x_i + \lambda_0 \xi_{jk} - \pi_{jk}, \quad k \in \Gamma_j, j \in M_{(g)}^{(\Gamma)},$$

$$\omega_j(\bar{\chi}) = \ln x_j - \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} a_{ij} \ln x_i + \lambda_0 \xi_j - \pi_j, \quad j \in M_{(g)},$$

$$\omega_{il}(\bar{\chi}) = \ln x_i + \lambda_0 - \pi_{il}, \quad i \in A_{(g)}^{(\Gamma)}, l \in \Gamma_i,$$

$$\varphi(\bar{q}) = \sum_{k \in B_{(g)}} v_k - N, \quad \varphi_i(\bar{q}) = \sum_{j \in M_{(g)}} a_{ij} v_j + \sum_{j \in M_{(c)}^{(*)}} a_{ij} n_j + v_i - b_i, \quad i \in A_{(g)}^{(0)},$$

$$\varphi_i(\bar{q}) = \sum_{j \in M_{(g)}} a_{ij} v_j + \sum_{j \in M_{(c)}^{(*)}} a_{ij} n_j + v_i + \sum_{l \in \Gamma_i} n_l - b_i, \quad i \in A_{(g)}^{(\Gamma)}.$$

• Определение функции $F(\bar{\chi})$ в качестве параметра оценки погрешности, где

$$F(\bar{\chi}) = \varphi_N^2(\bar{\chi}) + \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} \varphi_i^2(\bar{\chi}) + \sum_{i \in A_{(g)}^{(\Gamma)}} \left[\varphi_i^2(\bar{\chi}) + \sum_{l \in \Gamma_i} \omega_{il}^2(\bar{\chi}) \right] + \omega_0^2(\bar{\chi}) + \sum_{j \in M_{(g)}} \omega_j^2(\bar{\chi}) + \sum_{k \in \Gamma_j, j \in M_{(g)}^{(\Gamma)}} \omega_{jk}^2(\bar{\chi})$$

и где функция $F(\bar{\chi})$ достигает на множестве \mathfrak{S} своего наименьшего значения.

• Постулирование положения: в точке достижения минимума энергии Гиббса выполняются закон действующих масс и закон равенства химических потенциалов веществ в различных агрегатных состояниях.

4. Решение задачи (26) методом Ньютона при справедливости условий

- количество элементов в любом множестве Γ_k , при $\Gamma_k \subseteq B_{(c)}^{(*)}$ и $k \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$ не больше единицы,

- множество атомарных веществ $A \setminus A_{(g)}^{(\Gamma)}$ не пусто,

- множество условно существующих атомарных веществ пусто

основывается на выполнении следующих действий.

— Определение точки $\bar{\sigma}^{(l+1)}$ при известном $\bar{\sigma}^{(l)}$ с помощью суммы $\bar{\sigma}^{(l)} + \bar{\Delta}^{(l)}$, где $\bar{\Delta}^{(l)} = (\Delta_0^{(l)}, \Delta_N^{(l)}, \dots, \Delta_j^{(l)}, \dots, \Delta_{kl}^{(l)}, \dots)$, $j \in B_{(g)}$, $k \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$, $l \in \Gamma_k$, есть результат решения уравнения $\bar{W}(\bar{\sigma}^{(l)})\bar{\Delta}^{(l)} = -\bar{f}(\bar{\sigma}^{(l)})$, где для мат-

рицы Якоби справедливо $\bar{W}(\bar{\sigma}^{(l)}) = \begin{pmatrix} E & \bar{W}^{(12)}(\bar{\sigma}) \\ \bar{W}^{(21)}(\bar{\sigma}) & \bar{W}^{(22)}(\bar{\sigma}) \end{pmatrix}$.

— Идентификация условия сходимости метода Ньютона: при $\bar{\mu}_0 \ll 1$ метод сходится, в противоположном случае возможно не сходится, где

$$\bar{\mu}_0 = 2n\alpha_0 B_0 C, \quad \alpha_0 = \left\| \left[\bar{V}^{(22)}(\bar{\sigma}^{(0)}) \right]^{-1} \right\|_m, \quad B_0 = \left\| \bar{\sigma}^{(1)} - \bar{\sigma}^{(0)} \right\|_m,$$

$$C = \max \left(\max_{i \in X, j \in M_{(g)}} a_{ij}, \left(\bar{N}^{(0)} + 2B_0 \right) \max_{i \in X} b_i \right),$$

$$\bar{V}^{(22)}(\bar{\sigma}) = \bar{W}^{(22)}(\bar{\sigma}) - \bar{W}^{(21)}(\bar{\sigma})\bar{W}^{(12)}(\bar{\sigma}).$$

— Проекция точки $\bar{q}^{(l)} + \bar{\Delta}^{(l)}$ на множество Q определяет точку $\bar{\sigma}^{(l+1)}$.

— Фиксирование условия достижения решения: если для точки $\bar{q}^{(*)} \in Q$

при $\bar{\chi}^{(*)} = (\lambda_0^{(*)}, \bar{q}^{(*)}) \in \mathfrak{Z}$ выполнено неравенство $\delta(\bar{\chi}^{(*)}) \leq \varepsilon_F$, где

$\delta(\bar{\chi}) = \sqrt{F(\bar{\chi})}$, то соответствующая точка $\bar{\sigma}^{(*)}$ из Σ есть решение (26).

— Постулирование положения: решение методом Ньютона обеспечивает справедливость правила фаз Гиббса и справедливость физи-

$$\text{ко-химической оценки } \psi_s \left(p, T, \bar{q}^{(ll)} \right) \geq 0.$$

Таким образом, система нелинейных уравнений, эквивалентная рассматриваемой и решаемая методом Ньютона, обеспечивает решением, удовлетворяющим правилу фаз Гиббса.

5. Поиск начальной точки $\bar{n}^{(0)} \in \mathfrak{N}^{(0)}$, обеспечивающей сходимость метода Лагранжа–Ньютона при фиксированном $B_{(c)}^{(*)}$, осуществляется методом условного градиента, который основывается на построении последовательности точек $\left\{ \bar{q}^{(ll)} \right\}_{ll=1,2,\dots}$, где для начальной точки $\bar{q}^{(0)}$ справедливы определения: $v_i^{(0)} = b_i$, $i \in A_{(g)}$, $v_j^{(0)} = 0$, $j \in M_{(g)}$, $n_j^{(0)} = 0$, $j \in B_{(c)}^{(*)}$, $N^{(0)} = \sum_{i \in X} b_i$. При этом

выполняется следующая последовательность действий:

- С помощью симплекс–метода выполняется поиск точки минимума $\bar{q}^{(**)}$ в задаче $\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} \left\langle \text{grad} G(p, T, \bar{q}^{(ll)}), \bar{q} \right\rangle$, относящейся к классу задач линейного программирования.

- С помощью метода касательных и метода золотого сечения вычисляется значение $\alpha^{(*)}$, обеспечивающее $\min_{\alpha \in [0,1]} G \left(p, T, \bar{q}^{(ll)} + \alpha \left(\bar{q}^{(**)} - \bar{q}^{(ll)} \right) \right)$.

- Проверяется справедливость неравенства (25): если неравенство верно, то принимается, что задача (22) при данной требуемой точности решена.

- По формуле $\bar{q}^{(ll)} + \alpha^{(*)} \left(\bar{q}^{(**)} - \bar{q}^{(ll)} \right)$ вычисляются координаты точки $\bar{q}^{(ll+1)}$.

6. Определенность точки минимума $\bar{q}^{(*)}$, где $N^{(*)}$ есть координата суммарного числа молей газовой фазы, для задачи (22) при составе $B_{(c)}^{(*)}$ обеспечивает переход на решение вариационной задачи (17) для выбора нового множества $B_{(c),1}^{(*)}$. Формирование $B_{(c),1}^{(*)}$ реализуется с помощью поиска во множестве кри-

вых $\overline{G}_{B_{(c),(k)}^{(*)}}$ линии, которая для данного $N^{(*)}$, содержит наименьшее значение.

Поиск производится с помощью последовательности действий:

- построение прямой $L_{N^{(*)}}$, определяемой уравнением $N = N^{(*)}$, то есть параллельной оси $0\overline{G}$,
- вычисление точки пересечения прямой $L_{N^{(*)}}$ с кривой $\overline{G}_{B_{(c),1}^{(*)}}$, которая наиболее близка к оси $0N$.

Технология реализуется решением задачи (22) при дополнительных условиях: постоянстве $N = N^{(*)}$ и начальном представлении $B_{(c),1}^{(*)} = B_{(c)}$. Формирование множества $B_{(c),1}^{(*)}$ – фундамент для выполнения нового шага решения задачи (22).

7. Вычисление состава при справедливости условия $|B_{(g)}| > \aleph_{(g)}$, где $\aleph_{(g)} \geq \max(15, |X|)$, осуществляется на базе распределения веществ на преобладающие и непреобладающие, где для любого непреобладающего или условно существующего $j \in M_{(g)}$ принимается $\ln x_j = \sum_{i \in A_{(g)}^{(0)}} a_{ij} \ln x_i - \lambda_0 \xi_j + \pi_j$.

8. Суперпозиция метода условного градиента и метода Лагранжа–Ньютона для решения задачи (22) обеспечивает высокую скорость и надежность расчетов, что в частности продемонстрировано на рисунке 5 для топлива Воздух + РГ - 1 при $K_m = 0,3$ (массовое соотношение компонентов), где отображено изменение количества шагов $k_{1-2} = \frac{k_1}{k_2}$ метода Лагранжа–Ньютона и где k_1 есть количество шагов при неприменении, а k_2 – количество шагов при применении метода условного градиента для расчета начального приближения при переходе от решения, полученного для состояния $p, T_1 = const$ при $T_1 = 3000 K$, к состоянию $p, T_2 = const$ при температуре $T_2 \in \{1000 K, 1500 K, 2000 K, 2500 K\}$.

9. Анализ результатов вычислений параметров c_v и $\beta_T p$, частично представленных на рисунках 6–7 для топлива АТ + НДСМГ при $K_m = 0,3$, определил вывод: c_v и $\beta_T p$ есть непрерывные и положительно определенные функции, то есть наиболее вероятно, что состояние равновесия является механически и термически устойчивым.

10. Процесс поиска минимума энергии Гиббса при учете уравнения состояния реального газа (2) вида

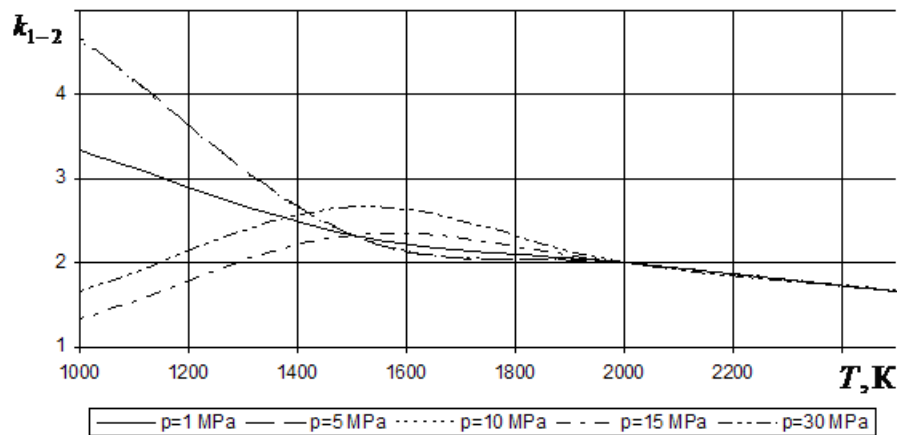


Рисунок 5 – Зависимость k_{1-2} от T

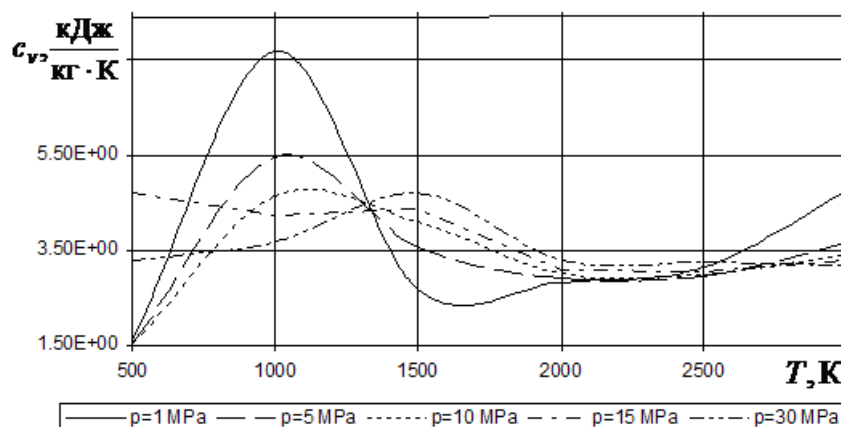


Рисунок 6 – Зависимость c_v от T

$$\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} \bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}). \quad (27)$$

имеет следующие особенности.

- Задача (27) эквивалентна задаче

$$\min_{\{B, B_j | j \in B(g)\}} \left\{ \bar{G}(p, T, \bar{q}^{(*)}) + \frac{A_G}{R_0 T} \right\}, \quad (28)$$

где $\bar{q}^{(*)}$ есть решение задачи

$$\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} \left\{ \bar{G}(p, T, \bar{q}) + \frac{A_G(p, T, \bar{q}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\})}{R_0 T} \right\} \quad (29)$$

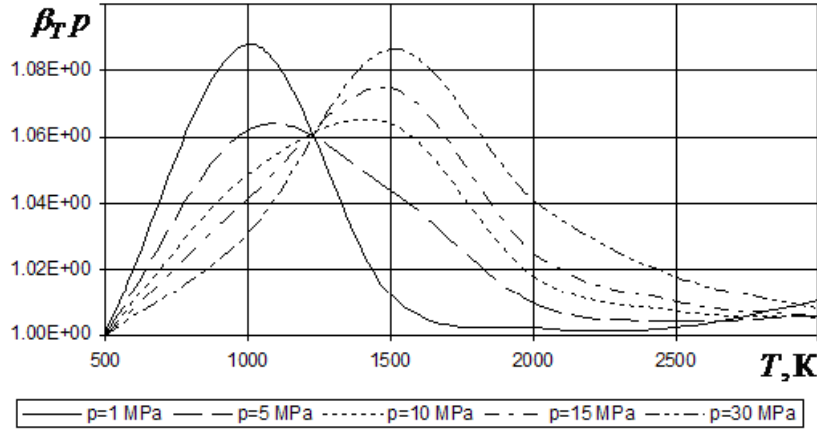


Рисунок 7 – Зависимость $\beta_T p$ от T

и где задача (29) в силу применения технологии осреднения и определенности состава множества конденсированных веществ принадлежит к классу задач выпуклого программирования.

- Решение задачи (28) реализуется посредством построения последовательности точек $\{\bar{\gamma}^{(l)}\}_{l=1,2,\dots}$, где $\bar{\gamma}^{(l)} = (B^{(l)}, \dots, B_j^{(l)}, \dots, \bar{q}^{(l-1)})$ и где $\bar{q}^{(l-1)}$ есть решение задачи (29) для фиксированных $B^{(l-1)}, B_j^{(l-1)}$ при $j \in B_{(g)}$. При этом известные значения координат точки $\bar{q}^{(l-1)}$ обеспечивают расчет $B^{(l)} = \sum_{j \in B_{(g)}} x_j^{(l-1)} B_j^{(l)}$, $B_j^{(l)} = \sum_{k \in B_{(g)}} x_k^{(l-1)} B_{jk}$, где в качестве точки $\bar{q}^{(0)}$ выступает решение задачи (22).

- Решение задачи (29) находится с помощью метода Лагранжа–Ньютона, то есть посредством решения $\bar{f}(\bar{\sigma}^{(l)}) - \bar{\theta}(\bar{\gamma}^{(l)}) = 0$, где для ненулевых координат вектора $\bar{\theta}(\bar{\gamma}^{(l)})$ справедливы определения:

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

$$\theta_{jk}(\bar{\gamma}^{(II)}) = \frac{p}{TR_0} \left(- \sum_{i \in A_{(g)}} a_{ij} \alpha_i(\bar{\gamma}^{(II)}) \right), k \in \Gamma_j, j \in M_{(g)}^{(\Gamma)}.$$

• Оценка точности решения для задачи (28) производится проверкой неравенства $\left\langle \text{grad} \bar{G}^{(r)}(p, T, \bar{q}, \{B, B_j \mid j \in B_{(g)}\}), \bar{q} - \bar{q}^{(*)} \right\rangle \geq -\varepsilon_{\bar{G}}$.

11. Анализ результатов расчетов относительных отклонений $\delta_h = 100(h - h^{(r)})/h, \%$, $\delta_s = 100(s - s^{(r)})/s, \%$, частично представленных на рисунках 8–9 для топлива O₂ + PГ - 1 при $K_m = 0,3$, определил вывод: при малых K_m справедливы оценки $|\delta_h| \leq 2\%$ и $|\delta_s| \leq 2\%$, что согласуется с известными положениями.

12. Вычисления минимума энтальпии $H^{(\min)}(p_0, T)$, максимума энтальпии $H^{(\max)}(p_0, T)$ и их сравнение с исходным значением H_0 энтальпии топливной композиции, что частично представлено на рисунке 10 для топлива O₂ + H₂ при $K_m = 5$, приводят к выводу: справедливы неравенства

$$\left| H^{(\min)}(p_0, T) - H_0 \right| < \left| H^{(\max)}(p_0, T) - H_0 \right|, H^{(\max)}(p_0, T) \geq H^{(\min)}(p_0, T),$$

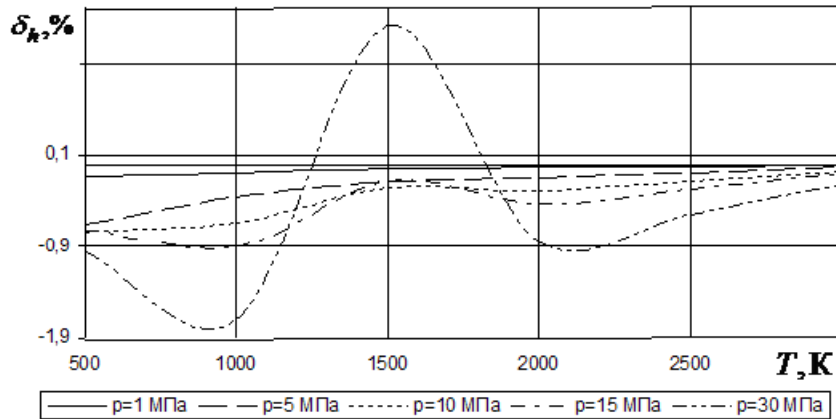


Рисунок 8 – Зависимость δ_h от T

исходная энтальпия наиболее близка к наименьшему значению $H^{(\min)}(p_0, T)$, а также существуют такие T , что $H_0 \notin [H^{(\min)}(p_0, T), H^{(\max)}(p_0, T)]$. Более того обнаружено, что чем меньше разность $\left| H^{(\min)}(p_0, T) - H_0 \right|$, тем данная температура T ближе к решению задачи. Данные оценки представляются фундаментом

решения задачи (20), позволяя существенно увеличить скорости вычислений и надежность расчетов.

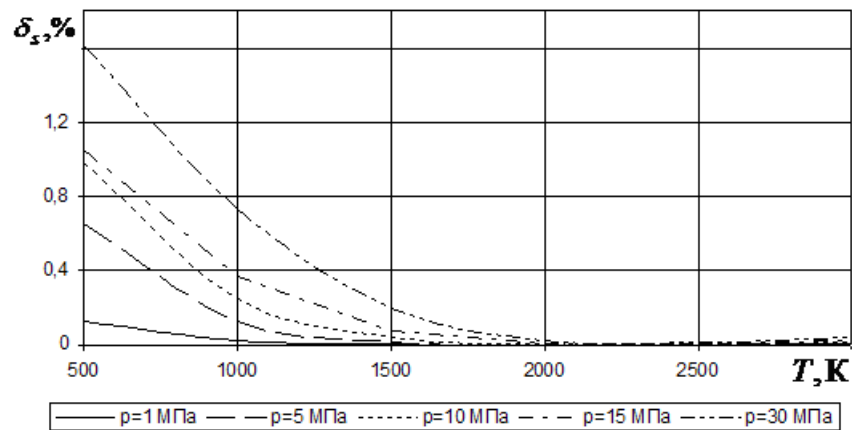


Рисунок 9 – Зависимость δ_s от T

13. Решение экстремальной задачи (20) поиска минимума приведенной энтропии при фиксированном $B_{(c)}^{(*)}$ основывается на построении последовательностей

$\left\{ \left[\underline{T}^{(l)}, \bar{T}^{(l)} \right] \right\}_{l=1,2,\dots}$, $\left\{ T^{(l)} \right\}_{l=1,2,\dots}$ при $T^{(l)} \in \left[\underline{T}^{(l)}, \bar{T}^{(l)} \right]$ и

$\left[\underline{T}^{(l)}, \bar{T}^{(l)} \right] \subset \left[\underline{T}^{(l-1)}, \bar{T}^{(l-1)} \right]$ с помощью выполнения следующих действий.

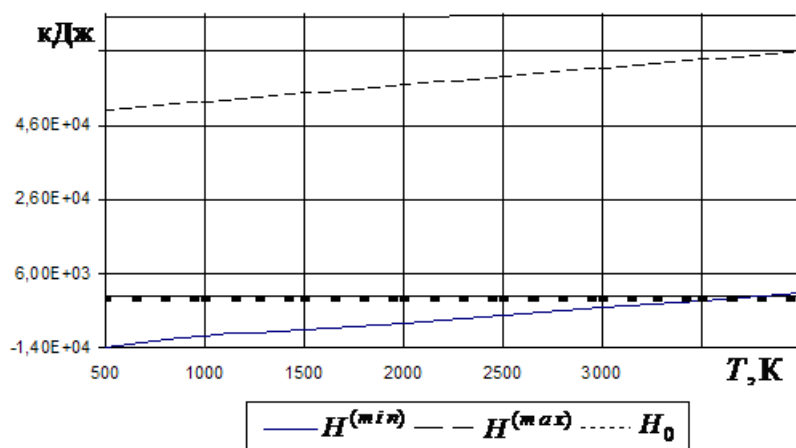


Рисунок 10 – Зависимости $H^{(\min)}(p, T)$, $H^{(\max)}(p, T)$ от T , $p = 30$ МПа

а) Поиск минимума $\min_{q \in Q^{(0)}} H(p_0, T^{(l)}, \bar{q})$ симплекс-методом и оценка разре-

шимости задачи (20) для данного $T^{(l)}$.

б) Решение задачи (22) поиска минимума приведенной энергии Гиббса для данного $T^{(l)}$.

с) Вычисление нового значения $T^{(l+1)}$ на базе решения уравнения (11) в

терминологии множества $Q^{(0)}$ методом Ньютона или методом половинного деления.

14. Определенность $T^{(ll)}$ для задачи (20) при составе $B_{(c)}^{(*)}$ обеспечивает переход на применение вариационной математической модели (12) для выбора нового множества $B_{(c),1}^{(*)}$. Формирование $B_{(c),1}^{(*)}$ реализуется с помощью поиска во множестве кривых $\bar{S}_{B_{(c),(k)}^{(*)}}$ линии, которая для данного $T^{(ll)}$ содержит наименьшее значение по аналогии с решением подобной задачи оптимизации $N^{(ll+1)}$ и поиска нового множества $B_{(c),1}^{(*)}$ при решении задачи (17). Определенность состава множества $B_{(c),1}^{(*)}$ – фундамент для выполнения нового шага решения задачи (20).

15. Задача поиска максимума энтропии при учете уравнения состояния реального газа (2) вида $\min_{T \in [T, \bar{T}], \bar{q} \in Q^{(0)}} \bar{S}^{(r)}(p, T, \bar{q})$ при ограничении

$H^{(r)}(p, T, \bar{q}) = H_0$, где $\bar{q} \in Q^{(0)}$, решается построением последовательностей $\left\{ \left[\underline{T}^{(ll)}, \bar{T}^{(ll)} \right] \right\}_{ll=1,2,\dots}$, $\left\{ T^{(ll)} \right\}_{ll=1,2,\dots}$, где $T^{(ll)} \in \left[\underline{T}^{(ll)}, \bar{T}^{(ll)} \right]$, на основе метода Ньютона или метода половинного деления при применении результатов решения задачи поиска минимума приведенной энергии Гиббса (28).

16. Вычисления экстремальных значений линейной части энтропии $S_{(L)}(p, T, \bar{q})$ и их сравнение с исходным значением энтропии S_0 , что частично представлено на рисунке 11 для топлива АТ + НДМГ при $K_m = 3$, где вертикальная пунктирная линия представляет температуру в равновесном состоянии, приводит к следующим выводам.

- Для экстремума $\underline{\gamma}_S^{(-0)}(p, T) = \frac{\underline{\gamma}_S(p, T)}{m_T \times 1000}$ и экстремумов

$$\underline{\gamma}_S^{(0)}(p, T) = \frac{\left[\underline{\gamma}_S(p, T) + \gamma_S \right]}{m_T \times 1000}, \bar{\gamma}_S^{(-0)}(p, T) = \frac{\bar{\gamma}_S(p, T)}{m_T \times 1000}, \bar{\gamma}_S^{(0)}(p, T) = \frac{\left[\bar{\gamma}_S(p, T) + \gamma_S \right]}{m_T \times 1000},$$

где $m_T = 1\text{кг}$ и где $\underline{\gamma}_S(p, T) = \min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} S_{(L)}(p, T, \bar{q})$, $\bar{\gamma}_S(p, T) = \max_{\bar{q} \in Q^{(0)}} S_{(L)}(p, T, \bar{q})$,

в сравнении с S_0 для любого T выполнено неравенство $\bar{\gamma}_S(p, T) \geq \underline{\gamma}_S(p, T)$, причем существует такая окрестность $\Omega_\varepsilon(T^{(*)})$ решения $T^{(*)}$, для каждой точки которой удовлетворено неравенство $|\underline{\gamma}_S(p, T) - S_0| < |\bar{\gamma}_S(p, T) - S_0|$. Более того, заданное значение энтропии S_0 наиболее близко к минимальному значению линейной части энтропии $\underline{\gamma}_S(p, T)$.

• Выявлено, что при выполнении $\underline{\gamma}_S(p, T) \leq S_0$ задача (21) является разрешимой. Таблица 2 включает параметры равновесных продуктов сгорания в выходном сечении сопла при давлении $p_a = 50\text{кПа}$. Из таблицы следует, что

$$\delta_{(L)}(p_a, T_a) = \frac{s_{(L)}(p_a, T_a)}{s(p_a, T_a)} \cdot 100, \%, \text{ то есть доля линейной части энтропии}$$

$s_{(L)}(p_a, T_a)$ в энтропии равновесной $s(p_a, T_a)$, превышает 94%.

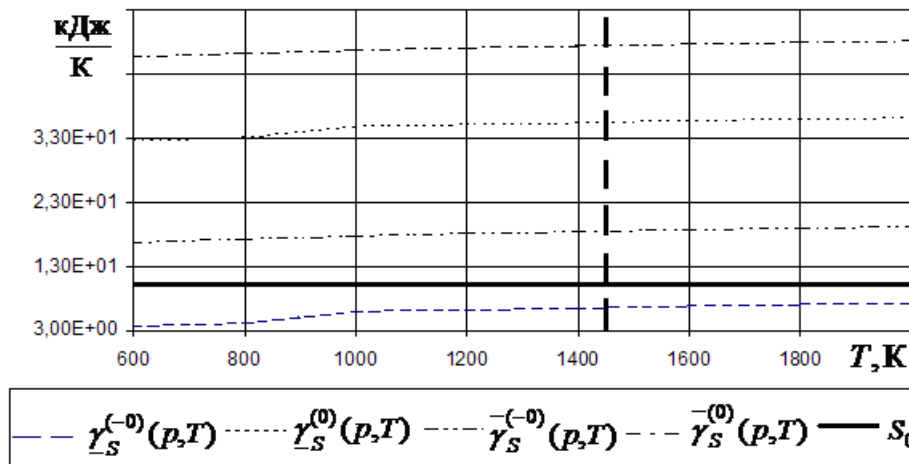


Рисунок 11 – Зависимости $\underline{\gamma}_S^{(-0)}$, $\underline{\gamma}_S^{(0)}$, $\bar{\gamma}_S^{(-0)}$, $\bar{\gamma}_S^{(0)}$ от T , $p = 30\text{кПа}$

• Из анализа таблиц 2, 3, где отображены экстремальные параметры

$$h_a^{(\min)} = h_a^{(\min)}(p_a, T_a, \bar{q}_{H,a}^{(\min)}), \quad s_{(L),a}^{(\min)} = s_{(L)}(p_a, T_a, \bar{q}_H^{(\min)}),$$

где $h_a^{(\min)}(p_a, T_a, \bar{q}_{H,a}^{(\min)}) = \min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} H(p_a, T_a, \bar{q})$, $s_{(L),a}^{(\min)} = s_{(L)}(p_a, T_a, \bar{q}_S^{(\min)})$ и

$\bar{q}_S^{(\min)}$ есть решение $\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} S(p_a, T_a, \bar{q})$, выводится, что в качестве наиболее точ-

ной оценки возможного значения $s_{(L)}(p_a, T_a)$ выступает $s_{(L),a}(\bar{q}_{H,a}^{-(\min)})$. Таким образом, если для данной температуры $T^{(0)}$ разность $\delta_s = \left| s_{(L),a}(\bar{q}_{H,a}^{-(\min)}) - s_{(L),a}^{(0)} \right|$, где $s_{(L),a}^{(0)} = 0,94 \cdot s_0$, определяет достижение приемлемой точности по $s_{(L),a}^{(0)}$, то $T^{(0)}$ есть наиболее хорошее начальное приближение.

Применение представленных оценок обеспечивает существенное увеличение скорости вычисления начального приближения $T^{(0)}$ для задачи (21) в силу отсутствия, по меньшей мере операций вычисления логарифма и экспоненты.

17. Технология решения задачи (21) аналогична технологии решения задачи (20), описанной в пункте 13, где

- на этапе а): задача $\min_{q \in Q^{(0)}} H(p_0, T^{(l)}, \bar{q})$ заменяется на задачу

$$\min_{\bar{q} \in Q^{(0)}} S_{(L)}(p, T^{(l)}, \bar{q}),$$

Таблица 2 – Параметры топлива O₂ + НДМГ

| $\alpha_{ок}$ | $h_a, \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$ | $T_a, \text{К}$ | $s_{(L)}(p_a, T_a), \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ | $\delta_{(L)}(p_a, T_a), \%$ |
|---------------|-------------------------------------|-----------------|--|------------------------------|
| 0,1 | -2445,495 | 750,0686 | 12,02947 | 94,6 |
| 0,5 | -4694,390 | 976,2850 | 12,08951 | 94,4 |
| 0,9 | -5700,285 | 2084,534 | 11,04766 | 96,3 |
| 1 | -5586,673 | 2249,528 | 10,82002 | 96,6 |
| 1,3 | -5048,004 | 1993,477 | 10,15346 | 96,3 |

- на этапе с): уравнение (11) заменяется на уравнение (14).

При этом этап решения с применением вариационной математической модели реализуется решением задачи (15), где формирование $B_{(c),1}^{(*)}$ реализуется с помощью поиска линии во множестве кривых $H_{B_{(c),(k)}^{(*)}}$.

18. Вблизи точки фазового или полиморфного перехода состав веществ с до-

статочной высокой точностью остается постоянным, что, например, подтверждается следующими данными (при точности не менее трех цифр):

Таблица 3. Экстремумы параметров топлива O₂ + НДМГ

| $\alpha_{ок}$ | $h_a^{(min)}, \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$ | $s_{(L),a}^{(min)}, \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ | $s_{(L),a} \left(\bar{q}_H^{(-min)} \right), \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ |
|---------------|---|--|--|
| 0,1 | -3418,531 | 7,334342 | 10,80387 |
| 0,5 | -6645,772 | 6,930387 | 9,90413 |
| 0,9 | -6058,529 | 8,100095 | 10,61471 |
| 1 | -6023,148 | 8,206262 | 10,69461 |
| 1,3 | -5103,479 | 7,815377 | 10,13917 |

- при $T = 273,161\text{К}$ для преобладающих веществ: $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,0120$, $x_{\text{H}_2} = 0,9879$, $n_{\text{H}_2\text{O}} = 24,7525$ и $N = 250,848$;
- при $T = 273,159\text{К}$: $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,0120$, $x_{\text{H}_2} = 0,9879$, $n_{\text{H}_2\text{O}} = 24,7588$ и $N = 250,848$,

полученными для топлива O₂ + H₂, где $K_m = 0,8$, $p = 50\text{кПа}$,

$$s_0 = 34,99653 \frac{\text{кДж}}{\text{К} \cdot \text{кг}}.$$

19. Задача поиска минимума энтальпии при учете уравнения состояния реального газа (2) вида $\min_{T \in [\underline{T}, \bar{T}], \bar{q} \in Q^{(0)}} H^{(r)}(p, T, \bar{q})$ при ограничении

$S^{(r)}(p, T, \bar{q}) = S_0$, где $\bar{q} \in Q^{(0)}$, решается построением последовательностей

$$\left\{ \left[\underline{T}^{(ll)}, \bar{T}^{(ll)} \right] \right\}_{ll=1,2,\dots}, \left\{ T^{(ll)} \right\}_{ll=1,2,\dots}, \text{ где } T^{(ll)} \in \left[\underline{T}^{(ll)}, \bar{T}^{(ll)} \right],$$

на основе метода Ньютона или метода половинного деления при применении результатов решения соответствующей задачи поиска минимума приведенной энергии Гиббса (28).

20. Фундаментальную основу анализа равновесного состояния замороженных систем составляют математические модели, аналогичные (8)–(11), (13)–(14), (9)–(10), где уравнения сохранения вещества заменяется на уравне-

ния постоянства количества молей конденсированных веществ во множествах Γ_j вида $\sum_{k \in \Gamma_j} n_k^{(\Gamma)} = \sigma_j^{(0)}$, где $\sigma_j^{(0)} > 0$ есть суммарное число молей веществ Γ_j в

точке замораживания для любого $j \in B_{(g)}^{(\Gamma)}$. При этом

- если для конденсированных веществ $k_1, k_2 \in \Gamma_j$ определен фазовый или полиморфный переход, то число молей k_1 вычисляется в виде

$$- \text{ для } p_0, H_0 = const \text{ в виде } n_{k_1} = \frac{H_0 - H^{(1)}(p_0, T, \bar{n}^{(0)}) - H_{k_2}^{(0)}(T)\sigma_j^{(0)}}{H_{k_1}^{(0)}(T) - H_{k_2}^{(0)}(T)},$$

$$- \text{ для } p_0, S_0 = const \text{ в виде } n_{k_1} = \frac{S_0 - S^{(1)}(p_0, T, \bar{n}^{(0)}) - S_{k_2}^{(0)}(T)\sigma_j^{(0)}}{S_{k_1}^{(0)}(T) - S_{k_2}^{(0)}(T)},$$

а число молей k_2 рассчитывается в форме $n_{k_2} = \sigma_j^{(0)} - n_{k_1}$,

- для замороженного равновесного состояния $T_0, S_0 = const$, фундаментальную основу математической модели составляет экстремальная задача

$$\max_{n_1, n_2} \ln p, \text{ что приводит к формальному выражению } \ln p = \frac{S^{(1)}(p, T_0, \bar{n}) - S_0}{NR_0} \text{ рас-}$$

чета давления без применения итерационных процессов.

21. Основу расчета параметров продуктов сгорания в любом, отличном от входного, сечении сопла составляет решение уравнения

$$\psi(p_a, T_a^{(*)}) = \psi^{(0)}. \quad (30)$$

Решение (30) производится на основе конструирования методом Ньютона или

методом половинного деления последовательностей $\{p^{(l)}\}_{l=1,2,\dots}$,

$\left\{ \left[\underline{p}^{(l)}, \bar{p}^{(l)} \right] \right\}_{l=1,2,\dots}$, где в качестве результата рассматривается такое $p^{(*)}$, для

которого справедливо неравенство $|\psi(p^{(l)}, T^{(*)}) - \psi^{(0)}| \leq \varepsilon_{\psi}^{(7)}$. Если ψ представ-

ляет геометрическую степень расширения \bar{F} , то расчет начального приближе-

ния по давлению реализуется решением уравнения $q(\lambda) = \bar{F}^{-1}$, где λ принад-

лежит интервалу $\left(0, \sqrt{\frac{n+1}{n-1}}\right)$, в каждой точке которого функция $q(\lambda)$ дифференцируема.

22. Анализ данных таблицы 4, где отображены скорости расчетов параметров сопла камеры ЖРД для различных топливных композиций, позволяет заключить, что технология Назыровой Р.Р., реализованная в форме программного комплекса *CTDsoftRG*, характеризуется существенно более высокими скоростями вычислений по сравнению с технологией программы АСТРА.4 / рс “Версия 1:07, 1991”, автором которой является Б.Г. Трусов.

23. Анализ данных таблицы 5, где отображены некоторые результаты расчета параметров процесса горения для топлива $O_2 + Al$, $\alpha_{ок} = 0.3$ при $p_0 = \text{МПа}$, приводит к выводу: фундаментальную основу программы Трусова Б.Г. составляет возможность нарушения правила фаз Гиббса.

Таблица 4 – Параметры скоростей при $p_0 = 50 \text{ МПа}$, $p_a = 0.5 \text{ кПа}$

| Топливо | Количество обращений | Время | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------------------|------------------|
| | | АСТРА.4 / рс “Версия 1:07, 1991” | <i>CTDsoftRG</i> |
| $O_2 + H_2, \alpha_{ок} = 0.3$ | 1 | 16 с. | 1 с. |
| | 1000 | 4 час. 27 мин. | 17 мин. |
| $O_2 + CH_{1.956}, \alpha_{ок} = 0.4$ | 1 | 18 с. | 4 с. |
| | 1000 | 5 час. | 1 час. 7 мин. |
| $AT + \text{НДМГ}, \alpha_{ок} = 0.5$ | 1 | 17 с. | 4 с. |
| | 1000 | 4 час. 44 мин. | 1 час. 7 мин. |
| $N_2O_4 + AlN_3, \alpha_{ок} = 0.1$ | 1 | 20 с. | 2 с. |
| | 1000 | 5 час. 34 мин. | 34 мин. |

Третья глава содержит результаты термодинамических расчетов параметров сопла камеры ЖРД, на основе применения разработанных программных средств.

1. Результаты расчета параметров процесса течения продуктов сгорания в сопле камеры ЖРД, частично представленные на рисунке 12 для топлива $O_2 + \text{РГ} - 1$ при $p_0 = 4 \text{ МПа}$ и на рисунке 13 для топлива $AT + \text{НДМГ}$ при

$p_0 = 20 \text{ МПа}$, приводят к выводу: предлагаемая технология расчетов

Таблица 5 – Параметры скоростей расчета сопла ЖРД для топлива
Воздух + $\text{CH}_{1.956}$

| p_0 , МПа | p_a , МПа | K_m | Время, с | |
|-------------|-------------|-------|--------------------------------------|----------------------|
| | | | АСТРА.4 / пс “Версия 1:07, 1991” [4] | <i>CTDsoftRG</i> [7] |
| 30 | 10,3,1,0.3 | 0.5 | 23.89 | 2.83 |
| | | 5 | 22.22 | 3.78 |
| 50 | 10,5,1,0.5 | 0.5 | 24.7 | 2.47 |
| | | 5 | 22.27 | 3.73 |

Таблица 6 – Параметры расчета процесса горения

| | АСТРА.4/пс “Версия 1:07, 1991” | <i>CTDsoftRG</i> |
|--|--------------------------------|------------------|
| n_{Al} | 12.676 | 0 |
| $n_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ | 2.6784 | 0.43785 |
| T, K | 4240.8 | 1689 |
| $h, \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$ | -83.895 | -83.895 |
| $s, \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{K}}$ | 4.7370 | 4.4008 |

- обеспечивает высокую надежность и точность вычислений с точки зрения получения графиков непрерывных и дифференцируемых функций,
- позволяет рассматривать получаемые кривые как совокупности линий, для которых в большинстве случаев уместно определение – пучок кривых,
- обуславливает справедливость утверждения: для любого значения давления p_0 существует мажоранта для $I_{\text{уп}}$ – кривая, определяющая максимально возможные энергетические возможности топлива на данном интервале возможных исходных составов и для данных геометрических характеристик сопла.

2. Анализ результатов расчета относительных отклонений $|\delta_\Phi|$, частично представленных на рисунках 14–15 для топлива Воздух + Этиловый спирт при $\alpha_{\text{ок}} = 0,7$ и для топлив Воздух + H_2 , Воздух + РГ -1, Воздух + Природный газ при $\alpha_{\text{ок}} = 0,6$, где $\delta_\Phi = 100(\Phi^{(c)} - \Phi) / \Phi^{(c)}, \%$ и где Φ получено при учете урав-

нения состояния идеального газа, а $\Phi^{(c)}$ выбрано из известных справочных данных, приводит к выводу: $\delta_T \leq 0,8\%$ и $\delta_{I_{уп}} \leq 0,13\%$, то есть налицо совпадение с приемлемой точностью с признанными справочными данными.

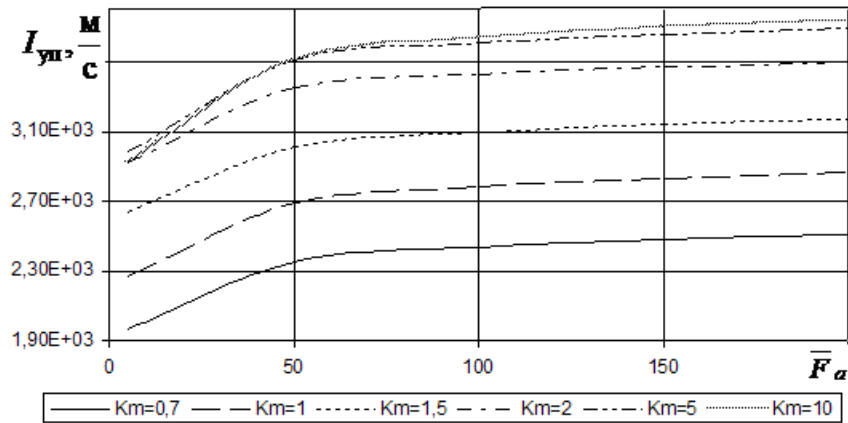


Рисунок 12 – Зависимость $I_{уп}$ от \bar{F}_a

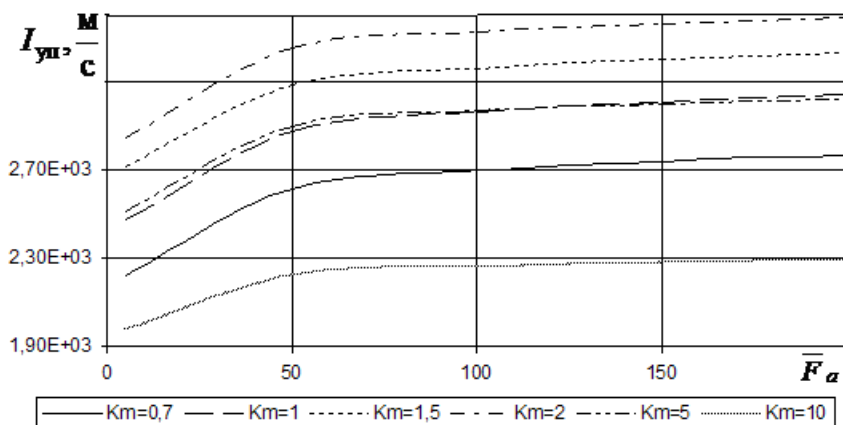


Рисунок 13 – Зависимость $I_{уп}$ от \bar{F}_a

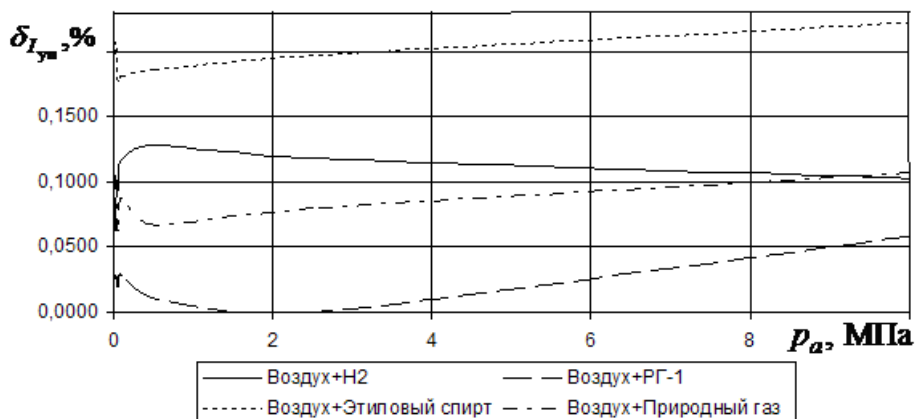


Рисунок 14 – Зависимость $\delta_{I_{уп}}$ от p_a , $p_0 = 50 \text{ MPa}$

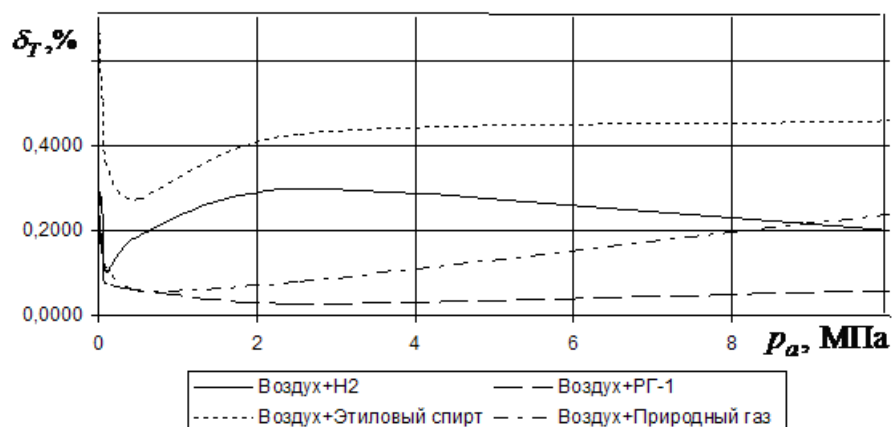


Рисунок 15 – Зависимость δ_T от p_a , $p_0 = 50$ МПа

3. Анализ результатов расчетов параметров $\Phi^{(r)}$, где $\Phi^{(r)}$ получено при учете уравнения состояния реального газа, и их относительных отклонений $\delta_\Phi = 100(\Phi - \Phi^{(r)})/\Phi, \%$, некоторые из которых отображены на рисунках 16–19, приводит к результату $\delta_\Phi \leq 0,9\%$, то есть подтверждается справедливость известного положения о незначительности отклонений.

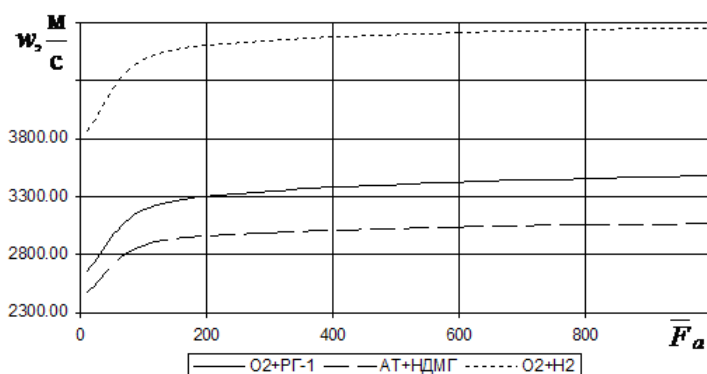


Рисунок 16 – Зависимость w от \bar{F}_a , $p_0 = 30$ МПа, $K_m = 5$

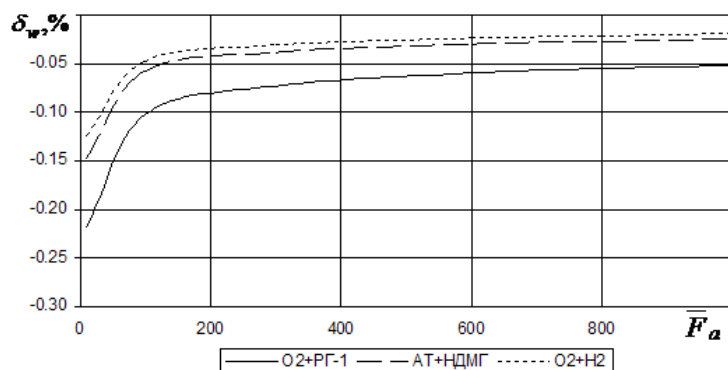


Рисунок 17 – Зависимость δ_w от \bar{F}_a , $p_0 = 30$ МПа, $K_m = 5$

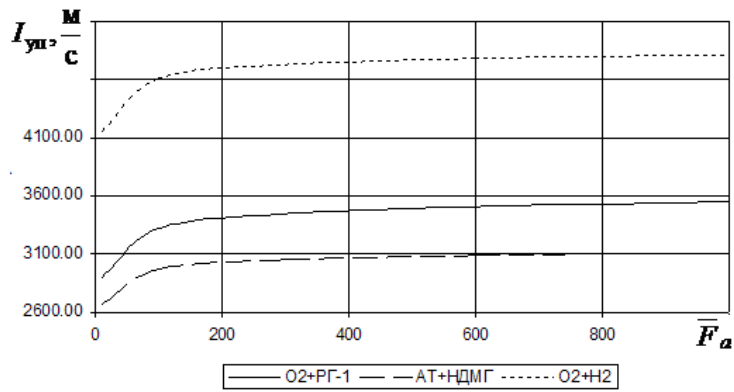


Рисунок 18 – Зависимость I_{yn} от \bar{F}_a , $p_0 = 30 \text{ МПа}$, $K_m = 5$

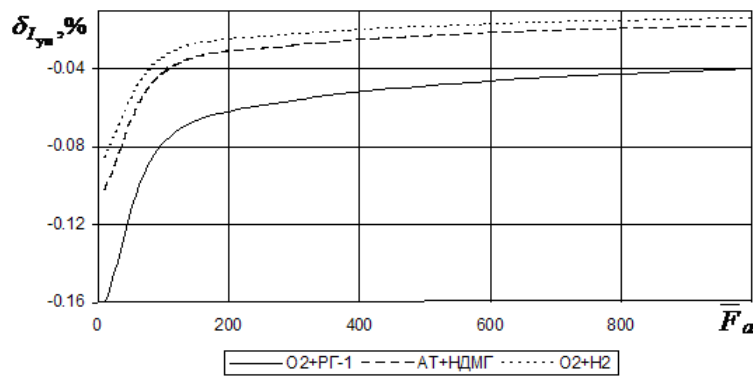


Рисунок 19 – Зависимость $\delta_{I_{yn}}$ от \bar{F}_a , $p_0 = 30 \text{ МПа}$, $K_m = 5$

4. Сравнительный анализ результатов расчета относительных отклонений $\delta_{\Phi}^{(III)}$ с относительными отклонениями $\delta_{\Phi}^{(I)}$ для процесса течения воздуха при $T_0 = 1300 \text{ К}$, где $\delta_{\Phi}^{(III)} = 100(\Phi^{(III)} - \Phi^{(r)})/\Phi^{(III)}, \%$, $\delta_{\Phi}^{(I)} = 100(\Phi^{(III)} - \Phi)/\Phi^{(III)}, \%$ и где $\Phi^{(III)}$ выбрано из известного справочника³, приводит к выводу: при условии $4 \text{ МПа} \leq p_0 \leq 10 \text{ МПа}$ в большинстве случаев справедливо неравенство $|\delta_{\Phi}^{(III)}| \ll |\delta_{\Phi}^{(I)}|$, то есть значения давления и температуры в выходном сечении достаточно близки к известным данным³.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Обоснована актуальность разработки программно-информационных систем термодинамического расчета параметров много-

³Шехтман А.М. Газодинамические функции реальных газов. Справочник / А.М. Шехтман. М., 1988.

компонентных, многофазных смесей веществ, участвующих в процессе течения в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя, на основе перехода на терминологию вариационных принципов механики.

2. На фундаменте анализа известных положений теории ракетных двигателей, химической термодинамики и механики жидкости и газа впервые определено, что наиболее общими математическими моделями описания равновесных состояний и процессов в сопле камеры ЖРД являются вариационные модели, определенные в терминологии задач вариационных принципов механики, для которых классические математические модели выступают как некоторые частные представления.

3. На основе математического и функционального анализа математических моделей многокомпонентных смесей реагирующих веществ, участвующих в процессе течения в сопле камеры ЖРД, впервые сформулированы и обоснованы критерии разрешимости задач, получены формальные выражения оценок сходимости решений и адекватности результатов расчетов исходным математическим и физико–химическим положениям.

4. Впервые разработаны математические методы расчета газодинамических, термодинамических и теплофизических свойств многокомпонентных смесей равновесно реагирующих веществ, обеспечивающие решение экстремальных задач вариационных математических моделей с существенно более высокими скоростями вычислений и надежностью результатов расчетов. При этом впервые сформулировано положение о взаимосвязи математических моделей и математических методов решений, когда, с одной стороны, фундаментальные основы математических моделей представляются наиболее сжатым и непротиворечивым набором утверждений, а, с другой стороны, корректно выбранные математические методы обеспечивают удовлетворение оставшихся неохваченными в постановках решаемых экстремальных задач положений.

5. Применение разработанных программно–информационных систем, по которым получены Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ, для решения задач термодинамического расчета свойств много-

компонентных смесей равновесно реагирующих веществ в камерах сгорания и соплах ЖРД определило целесообразность рекомендации разработанных технологий к применению для исследования параметров продуктов сгорания для достаточно обширной области значений давлений и температур. Результаты исследований внедрены в практику работы ряда ведущих предприятий ракетно–космической отрасли.

Полученные результаты представляются фундаментом перехода на функциональный уровень термодинамического расчета параметров процесса течения в сопле камеры жидкостного ракетного двигателя.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

По теме диссертации опубликовано более 80 работ, наиболее значимыми из которых являются следующие.

1. Алемасов В.Е. Термодинамика высокотемпературных процессов: физические, математические и программные основы оценки / В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Известия. АН. Энергетика. – 1998. – № 3. – С. 7-24.
2. Алемасов В.Е. О наследственных погрешностях аппроксимации термодинамических свойств индивидуальных веществ / В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Теплофизика высоких температур. – 1990. – Т. 28, № 4. – С. 805-807.
3. Дрегалин А.Ф. Об атомарном базисе термодинамических расчетов / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова, О.А. Автономова // Теплофизика высоких температур. – 1988. – Т. 26, № 3. – С. 472-477.
4. Назырова Р.Р. IT-технологии моделирования реальности рабочих тел в процессах жидкостных ракетных двигателей / Р.Р. Назырова, Н.Б. Пономарев // Инженерный журнал: наука и инновации. – 2013. – Вып. 4. – С. 69-85.
5. Дрегалин А.Ф. И вновь о нулевом приближении при расчете равновесного состава / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Известия вузов. Авиационная тех-

ника. – 1994. – № 2. – С. 57-62.

6. Дрегалин А.Ф. О введении элементов искусственного интеллекта в теплоэнергетику / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Известия вузов. Авиационная техника. – 1993. – № 4. – С. 90-94.

7. Дрегалин А.Ф. Термодинамическая оценка отсутствия теплообмена между фазами для двухфазных течений / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Известия вузов. Авиационная техника. – 1986. – № 3. – С. 60-61.

8. Дрегалин А.Ф. О расчете равновесных составов ступенчатым методом / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Известия вузов. Авиационная техника. – 1990. – № 4. – С. 82-84.

9. Дрегалин А.Ф. О нулевом приближении при расчете равновесного состава / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова, О.А. Автономова // Известия вузов. Авиационная техника. – 1988. – № 3. – С. 87-89.

10. Дрегалин А.Ф. Искусственный интеллект в термодинамических исследованиях / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова // Проблемы ракетной и космической техники. – М., 1994. – С. 86-90. – (Тр. XXVII чтений К.Э.Циолковского)

11. Назырова Р.Р. О нулевом приближении по давлению и температуре в расчете параметров течения / Р.Р. Назырова // Известия вузов. Авиационная техника, 1993. – № 1. – С. 107-109.

12. Назырова Р.Р. О расчете равновесных составов. Введение непрерывности / Р.Р. Назырова, А.Ф. Дрегалин, Д.Г. Новиков // Известия вузов. Авиационная техника, 1991. – № 4. – С. 78-80.

13. О программно-информационной системе TDsoft / А.Ф. Дрегалин, Р.Р. Назырова, Т.Р. Ситдииков, И.Н. Балашов // Известия вузов. Авиационная техника, 1994. – № 1. – С. 102-106.

14. Назырова Р.Р. Непрерывный метод расчета состава. 1. О терминологии неизвестных / Р.Р. Назырова // Теплофизика высоких температур, 1996. – Т.34, вып. 3. – С. 496.

15. Назырова Р.Р. Непрерывный метод расчета состава. II. Теорема о существовании и сходимости / Р.Р. Назырова // Теплофизика высоких температур,

1996. – Т.34, вып. 6. – С. 990.

16. Назырова Р.Р. Непрерывный метод расчета состава. III. О нулевом приближении / Р.Р. Назырова // Теплофизика высоких температур, 1997. – Т.35, вып. 1. – С. 164.

17. Назырова Р.Р. Непрерывный метод расчета состава. IV. О решении проблемы “критической” точки / Р.Р. Назырова // Теплофизика высоких температур, 1997. – Т.35, вып. 3. – С. 512.

18. Назырова Р.Р. Программно-информационная система моделирования термодинамических процессов (TDsoftXL) / Р.Р. Назырова, А.Л. Воинов. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2012610558 от 10.01.2012.

19. Назырова Р.Р. Термодинамический расчет параметров многокомпонентных равновесных реагирующих систем (CTDsoft) / Р.Р. Назырова, А.Л. Воинов. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. №2011610156 от 11.01.2011.

20. Назырова Р.Р. Программно-информационная система моделирования термодинамических процессов и свойств веществ с учетом уравнения состояния реального газа (TDsoftRGXL) / Р.Р. Назырова, А.Ю. Ильина, Н.Б. Пономарев. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. №2014617910 от 06.08.2014.

21. Назырова Р.Р. Термодинамический расчет параметров течения и свойств многокомпонентных газовых смесей с учетом уравнения состояния реального газа (CTDsoftRG) / Р.Р. Назырова, А.Ю. Ильина, Н.Б. Пономарев. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. №2014617911 от 06.08.2014.

22. Назырова Р.Р. Термодинамический расчет параметров течения и свойств продуктов каталитического разложения веществ (CTDsoftDcm) / Р.Р. Назырова, А.Ю. Ильина, Н.Б. Пономарев. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. №2015619553 от 08.09.2015.

23. Назырова Р.Р. Программно-информационная система моделирования

термодинамических процессов и свойств продуктов каталитического разложения веществ (TDsoftDcmXL) / Р.Р. Назырова, А.Ю. Ильина, Н.Б. Пономарев. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. №2015619544 от 08.09.2015.

24. Назырова Р.Р. Анализ термодинамических свойств индивидуальных веществ / Р.Р. Назырова // НКТЭ–2006. – Т. 1. – С. 57-60.

25. Назырова Р.Р. Исследование операций в оценке термодинамических характеристик / Р.Р. Назырова. – Казань: АБАК, 1999. – 198 с.

26. Назырова Р.Р. К вопросу о специальных множествах и функциях / Р.Р. Назырова // Геометрическая теория функций и краевые задачи. – Казань, 2000. – С. 117-120. – (Труды Математического центра имени Н.И.Лобачевского; Т. 13).

27. Назырова Р.Р. Об оценке параметров термодинамических систем на основе топологии гильбертовых и банаховых пространств / Р.Р. Назырова // Краевые задачи аэрогидромеханики и их приложения – Казань, 2000. – С. 237-245. – (Тр. Математического центра имени Н.И.Лобачевского; Т.7).

28. Назырова Р.Р. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / Р.Р. Назырова. – Казань: Изд-во Казанского университета, 2006. – 1 кн. Фурье–анализ.– 183с.

29. Назырова Р.Р. Термодинамика равновесных систем как фундаментальная основа анализа проблем глобальной интеграции / Р.Р. Назырова // НКТЭ–2006. – С.73-76.

30. Новые информационные технологии в исследовании характеристик энергоустановок / Р.Р. Назырова, И.Н. Балашов, Е.Ю. Шишов, Н.Р. Назырова // Материалы конференции НТИ–96, 1995. – С. 92-94.

31. Назырова Р.Р. Вариационное исчисление как фундамент исследования течения среды при учете уравнения состояния реальных газов [Электронный ресурс] / Р.Р. Назырова // Труды МАИ, 2017. – № 92. – URL: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=76946> (дата обращения: 28.08.2017).

32. Nazyrova R.R. On the Expert Thermodynamic Analysis of Power Engineering Problems / R.R. Nazyrova, V.Ye. Alemasov, A.F. Dregalyn // Thermodynamic Mod-

elling and Materials Data Engineering, 1994. – P. 180.

33. Nazyrova R.R. Thermodynamic Research of Energy System Based on the New Information Technologies / R.R. Nazyrova // Proceeding of the 4th International World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 1997. – P. 451-455.

34. Alemasov V.Ye. On conceptions set of reacting systems thermodynamics / V.Ye. Alemasov, A.F. Dregalyn, R.R. Nazyrova // TKE'96 Terminology and Knowledge Proceeding of the 4th International Congress on Terminology and Knowledge Engineering, 1996. – P. 52-54.

35. Nazyrova R.R. Knowledge base on alternative resource / R.R. Nazyrova // Proceeding of the 4th Japan International SAMPE Symposium, 1995. – V. 2 – P.903-906.

36. Nazyrova R.R. On search of new methods and means to transformate energy by L.S. Pontryagins principle of maximum / R.R. Nazyrova // Международная конференция, посвященная девяностолетию со дня рождения Л.С.Понтрягина. Оптимальное управление и добавления, 1998. – С. 145-147.