

УДК 629.7 : 533.6

Модели нестационарных термогазодинамических процессов в ракетных двигателях с учетом химического равновесия продуктов сгорания

**Алиев А. В.^{1,*}, Воеводина О. А.¹,
Пушина Е. С.¹**

^{*}aliev@istu.ru

¹ИжГТУ имени М.Т. Калашникова», Ижевск, Россия

Рассматриваются методики расчета нестационарных внутрикамерных процессов в ракетных двигателях твердого топлива (РДТТ), основанные на двух подходах. Первый подход предполагает рассмотрение продуктов сгорания как инертной механической смеси, другой подход – как смесь, находящуюся в химическом равновесии. Для повышения надежности в алгоритме решения системы нелинейных уравнений химического равновесия при определении итерационных поправок вместо метода Гаусса используется ортогональный QR-метод. Кроме того, рассмотрена возможность применения в задаче о составе продуктов сгорания генетических алгоритмов. Показано, что в задачах, связанных с прогнозированием нестационарных внутрибаллистических характеристик в твердотопливных регулируемых двигательных установках, применение моделей механической смеси и химически равновесного состава продуктов сгорания приводит к качественно и количественно совпадающим результатам. Максимальное отличие параметров не превосходит 5-10%. В задачах о выходе на режим маршевого РДТТ с высокотемпературными продуктами сгорания отличие в результатах более существенно, и может достигать 20% и более.

Ключевые слова: ракетный двигатель, твердое топливо, химическое равновесие, внутренняя баллистика, QR-метод, генетический алгоритм

Введение

В современных методиках расчета задач внутренней баллистики ракетных двигателей твердого топлива (РДТТ) основное допущение, принимаемое при построении математических моделей процессов, состоит в том, что продукты сгорания в камере сгорания полагаются химически инертной механической смесью (замороженной смесью) газа, первоначально заполнявшего камеру (например, воздуха), продуктов сгорания воспламенительной навески и продуктов сгорания твердого топлива [1,2]. Тем не менее, нельзя исключать из рассмотрения кинетические эффекты, обусловленные химическим взаимодействием отдельных компонентов продуктов сгорания, количество которых может

быть более сотни [3-5]. Однако учет кинетических эффектов при решении задач проектирования РДТТ представляется весьма трудоемким из-за ограниченности используемых ресурсов ЭВМ и из-за отсутствия достоверных данных о кинетических параметрах, учитываемых в расчетах химических реакций.

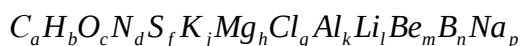
В [6,7] при решении термодинамических задач в химических реакторах (к ним можно отнести РДТТ) полагается, что в камере сгорания практически мгновенно устанавливается химическое равновесие. Такое допущение, как и допущение о течении замороженной смеси, не в полной мере соответствует действительности, поскольку скорость отдельных химических реакций может быть относительно невысокой. В связи с этим реальные термодинамические характеристики продуктов сгорания в условиях РДТТ будут принимать значения, размещающиеся в интервале между характеристиками продуктов сгорания, полученных в условиях химически инертной смеси и полученных в условиях полного химического термодинамического равновесия. Два решения как асимптоты устанавливают границы реальных значений параметров, которые могут быть получены с использованием моделей течения химически реагирующих смесей газа, однако требуемые вычислительные ресурсы при этом становятся приемлемыми при решении задач проектирования РДТТ.

Представляет интерес разработка методик расчета задач внутренней баллистики РДТТ с учетом химически равновесных процессов в камере сгорания двигателя. Наличие таких методик позволит оценить влияние процессов химической кинетики на точность прогнозирования рабочих характеристик РДТТ. Следует заметить, что вопросы, связанные с расчетом равновесного состава продуктов сгорания, актуальны и в задачах, связанных с утилизацией РДТТ [8], так как позволяют установить наличие в продуктах переработки вредных и токсичных веществ.

Постановка задачи о химически равновесном составе продуктов сгорания и методы решения

Существует большое количество программных продуктов, позволяющих выполнить расчет химически равновесного состава продуктов сгорания, ссылки на которые содержатся, например, в [7,9]. Однако применение их в составе программ расчета нестационарных задач внутренней баллистики для РДТТ различных типов может оказаться затруднительным. Это объясняется тем, что при численном решении нестационарных задач внутренней баллистики расчет химически равновесного состава продуктов сгорания осуществляется многократно (на каждом шаге интегрирования по времени и для каждого рассматриваемого в камере сгорания элементарного объема – до миллиона и более раз). В связи с этим надежность решения задачи внутренней баллистики в существенной степени определяется надежностью вычислительных алгоритмов расчета химически равновесного состава. В [6,7] для решения задачи о равновесном составе продуктов сгорания применяется итерационный алгоритм, при этом отмечается, что надежность алгоритма, время решения задачи определяются удачным выбором

начального приближения. Однако необходимо отметить, что в отдельных случаях, например, для рецептур с условной формулой вида



применение алгоритмов [6,7] (использовалась программа [9]) во избежание вычислительной неустойчивости (и, как следствие, аварийного завершения расчетов на вычислительной технике) требует тщательной подготовки исходных данных. На практике, при решении задачи о выходе ракетного двигателя на режим, задачи о работе двигательной установки на переходных режимах и т.д., с учетом многократного решения задачи о составе продуктов сгорания, практически невозможно исключить аварийное завершение расчетов задачи внутренней баллистики.

Ниже рассматриваются модификации разработанного в [6,7] метода, погрешности расчетов в которых не накапливаются, что в итоге обеспечивает устойчивость численного метода и его высокую надежность.

Задача о составе продуктов сгорания твердого топлива в соответствии с [6,7] может быть сведена, например, к следующей системе нелинейных уравнений для неизвестных $\gamma_i = \ln p_i$, $i = 1, I + J$ и M_T (здесь I, J, p_i - соответственно, количество элементарных веществ в составе продуктов сгорания, количество соединений и парциальные давления элементарных веществ и соединений)

$$\gamma_j - \sum_{i=1}^I a_{ij} \gamma_i + \ln K_j^p = 0, \quad j = 1, J; \quad (1)$$

$$\ln\left(\sum_{j=1}^q a_{ij} \cdot \exp(\gamma_j)\right) - \ln M_T - \ln b_{iT} = 0, \quad i = 1, I; \quad (2)$$

$$\ln\left(\sum_{l=1}^{I+J} \exp(\gamma_l)\right) - \ln p = 0. \quad (3)$$

В этой системе записаны J уравнений для химических реакций, I уравнений сохранений массы для исходных веществ, входящих в состав условной формулы твердого топлива, и уравнение Дальтона для парциальных давлений каждого из $J+I$ веществ.

Здесь и ниже приняты следующие обозначения:

- K^p - константа химического равновесия;
- M_T - число молей исходных веществ;
- a_{ij} - количество атомов i - го химического элемента в j - ом веществе;
- b_{iT} - коэффициенты, определяющие состав топлива;
- p - давление продуктов сгорания.

В соответствии с [6] уравнения решаются методом Ньютона, при этом значения неизвестных γ_i и M_T устанавливается итерационным алгоритмом (n – номер итерации)

$$\gamma_i^{(n+1)} = \gamma_i^{(n)} + \Delta_i, \quad i=1, I+J,$$

$$M_T^{(n+1)} = M_T^{(n)} + \Delta_{I+J+1},$$

Поправки Δ_i , ($i=1, I+J+1$) устанавливаются решением системы линейных уравнений вида $\mathbf{A}\Delta = \mathbf{B}$. Здесь $\mathbf{A}$ - матрица – якобиан, построенный для уравнений (1)–(3), $\mathbf{B}$ - вектор правых частей. Элементы матрицы $\mathbf{A}$ и вектора $\mathbf{B}$ пересчитываются на каждой итерации. Решение системы линейных уравнений на каждой итерации для неизвестных Δ_i в [6,9] осуществляется методом Гаусса [10]. Однако известно, что погрешность метода Гаусса возрастает с увеличением количества неизвестных в системе линейных уравнений. Более того, из-за изменения якобиана на каждой итерации велика вероятность вырождения матрицы $\mathbf{A}$ (вырождение соответствует нулевому значению определителя матрицы $\mathbf{A}$). Перечисленные особенности в ряде случаев приводят к аварийному завершению метода Ньютона при решении системы уравнений (1)–(3), что неприемлемо при решении нестационарных задач внутренней баллистики. Тем не менее, существуют ортогональные методы решения систем линейных уравнений [10,11], особенностью которых является их устойчивость к накоплению ошибок вычислений. Один из таких методов состоит в представлении матрицы $\mathbf{A}$ в виде произведения двух матриц - $\mathbf{A} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}$, в котором $\mathbf{Q}$ является ортогональной матрицей ($\mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^T = \mathbf{E}$), а $\mathbf{R}$ - нижней треугольной матрицей. Определение поправок Δ_i в этом случае устанавливается решением матричного уравнения $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} \cdot \Delta_i = \mathbf{B}$. В силу специфики матриц $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$ решение этого уравнения не вызывает затруднений [12]. В целом, трудоемкость QR-метода в несколько раз превосходит трудоемкость метода Гаусса, но ценой за это является абсолютная надежность сходимости метода Ньютона в применении к системе уравнений (1)–(3). Отметим, что в [13] отмечается эффективность применения для решения задач равновесной термодинамики методов факторизации, что, по существу, является применением QR - разложений квадратной матрицы.

Другой способ решения системы нелинейных уравнений (1)–(3) состоит в представлении задачи о химически равновесном составе продуктов сгорания как задачи математического программирования. Такой подход был предложен в [14]. Если учесть, что на значения переменных γ_i и M_T нет необходимости установления каких-либо ограничений, то задача математического программирования может быть сформулирована как задача безусловной оптимизации. При постановке задачи безусловной оптимизации целевую функцию $\Phi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{I+J}, M_T)$ запишем, например, в виде

$$\begin{aligned} \min \Phi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{I+J}, M_T) = & \delta_1 \cdot \sum_{j=1}^J (\gamma_j - \sum_{i=1}^I a_{ij} \cdot \gamma_j + \ln K_j^p)^2 + \\ & + \delta_2 \cdot \sum_{i=1}^I (\ln(\sum_{j=1}^q a_{ij} \cdot \exp(\gamma_j)) - \ln M_T - \ln b_{iT})^2 + \delta_3 \cdot (\ln(\sum_{l=1}^{I+J} \exp(\gamma_l)) - \ln p)^2 \end{aligned} \quad (4)$$

В формуле для целевой функции, минимум которой необходимо обеспечить, $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ - масштабные коэффициенты, значения которых могут быть приняты, например, $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 1$.

В связи с появлением новых эффективных методов решения задач математического программирования (задач оптимизации) такая постановка заслуживает внимания, в частности, весьма эффективным является метод, основанный на генетических алгоритмах [15].

Последовательность решения задачи о равновесном составе продуктов горения топлива при использовании генетического алгоритма устанавливается в следующем порядке:

- задается генотип (набор независимых аргументов целевой функции, состоящий из значений парциальных давлений p_i и M_m). Каждая из переменных – это конкретный ген. Хромосомой $\mathcal{G}$ будем называть вектор, содержащий конкретные значения переменных p_i и M_m . Началу решения задачи соответствует популяция, состоящая из N особей, каждая из которых обладает уникальной хромосомой - $\mathcal{G}_n = \mathcal{G}(\gamma_1^{(n)}, \gamma_2^{(n)}, \dots, \gamma_{I+J}^{(n)}, M_m^{(n)})$. Популяция из N особей обновляется за счет скрещиваний;

- для каждой особи рассчитывается функционал $\Phi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{I+J}, M_T)$. Особь, соответствующая наименьшему функционалу, переносится в новое поколение;

- если значение $\Phi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{I+J}, M_T)$ превосходит заданную точность, то принимается решение о необходимости проведения новой итерации и расчете нового поколения;

- производится обновление рассчитанной популяции за счет скрещиваний. При очередном скрещивании хромосомы $\mathcal{G}_n$ пересчитываются по алгоритму, называемому кроссовером. Кроссовер строится так, чтобы учесть значения хромосом, принимавших участие в скрещивании, и соответствующие этим хромосомам значения целевых функций. На очередном этапе алгоритма состав популяции пересматривается. Из его состава удаляются слабые хромосомы и добавляются вновь полученные новые сильные (с точки зрения значения целевой функции) хромосомы. Новый ген, входящий во вновь рассчитываемую уникальную хромосому $\mathcal{G}'_n = \mathcal{G}(\gamma_1^{(n)}, \gamma_2^{(n)}, \dots, \gamma_{I+J}^{(n)}, M_m^{(n)})$, на очередной итерации рассчитывается как линейная комбинация генов, входящих в хромосомы с номерами s и t

$$\mathcal{G}'_n = a \cdot \mathcal{G}'_s + b \cdot \mathcal{G}'_t.$$

Значения коэффициентов a и b рассчитываются по формулам

$$a = 1 + \alpha - u(1 + 2\alpha), \quad b = u(1 + 2\alpha) - \alpha; \quad \alpha \in [0,1], \quad u \in (0,1).$$

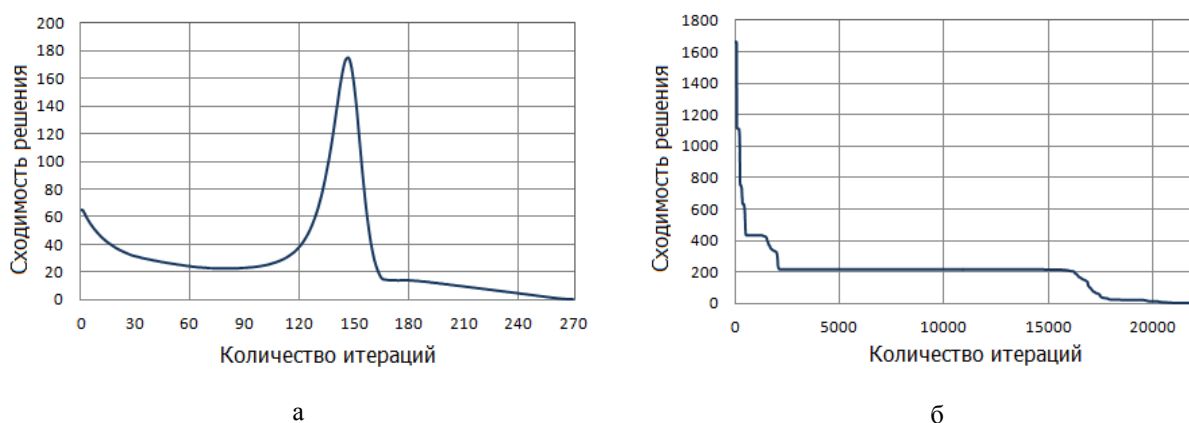
Расчеты по записанному алгоритму выполняются до тех пор, пока величина целевой функции для какой-либо особи внутри хромосомы не станет меньше заданного условия по точности. Следует отметить, что решение системы нелинейных уравнений (1)-(3) с

использованием генетических алгоритмов обеспечивается практически с любой наперед заданной точностью [16]. К недостаткам этих алгоритмов следует отнести большое количество потребных для решения итераций.

На рисунке 1 представлены зависимости, показывающие сходимость решения нелинейных уравнений (1)-(3) QR-методом (рисунок 1а) и генетическим методом (рисунок 1б). Расчет выполнен для безметалльного состава топлива, условная формула которого имеет вид $C_h H_m O_r N_t Cl_q$. Следует отметить, что расчеты выполнялись для самых разнообразных рецептов топлива, в том числе, с условной формулой вида



Высокая надежность алгоритмов расчета задачи о химически равновесном составе продуктов сгорания топлива позволяет включить эти алгоритмы в программные продукты, обеспечивающие расчеты внутренней баллистики РДТТ типовых конструкций, в том числе, и регулируемых [17].



(а – метод Ньютона в сочетании с QR - методом, б – генетический алгоритм)

Рисунок 1 – Сходимость методов решения задачи о химически равновесном составе продуктов

Отметим, что при известном составе продуктов сгорания значения удельных теплоемкостей C_p , C_v для смеси продуктов сгорания устанавливаются соотношениями

$$c_v = \sum_{i=1}^{I+J} \alpha_i c_{v_i} ; c_p = \sum_{i=1}^{I+J} \alpha_i c_{p_i} . \quad (5)$$

В модели химически инертной смеси удельные теплоемкости определяются формулами

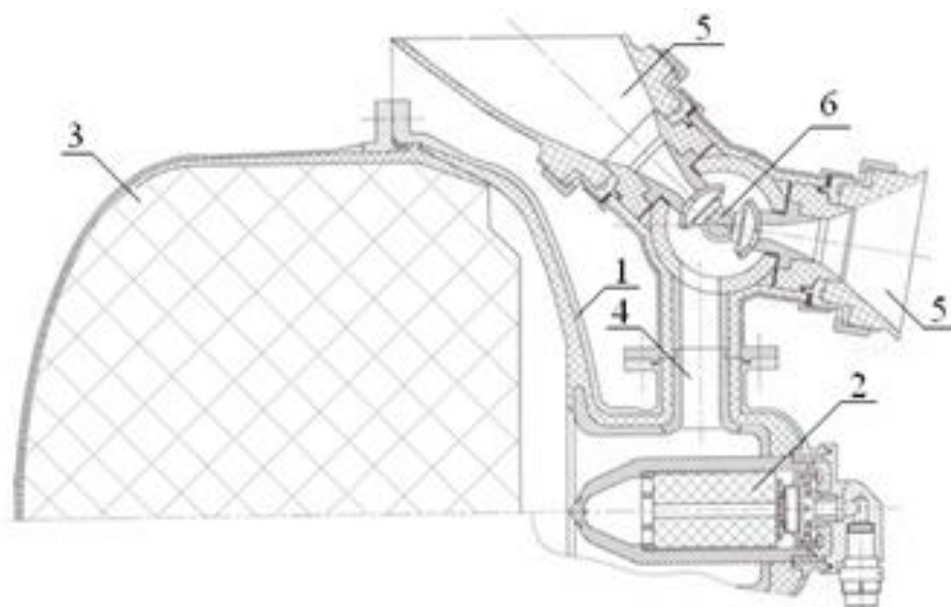
$$c_v = c_{v\epsilon} \alpha_\epsilon + c_{vm} \alpha_m + c_{v0} \alpha_0 ;$$

$$c_p = c_{p\epsilon} \alpha_\epsilon + c_{pm} \alpha_m + c_{p0} \alpha_0 .$$

В последних уравнениях α_0 , α_ϵ , α_m - массовые концентрации в продуктах сгорания воздуха, первоначально заполнявшего камеру сгорания РДТТ, продуктов сгорания навески воспламенительного состава и продуктов сгорания твердого топлива. Удельные теплоемкости, входящие в эти уравнения, соответствуют этим же компонентам.

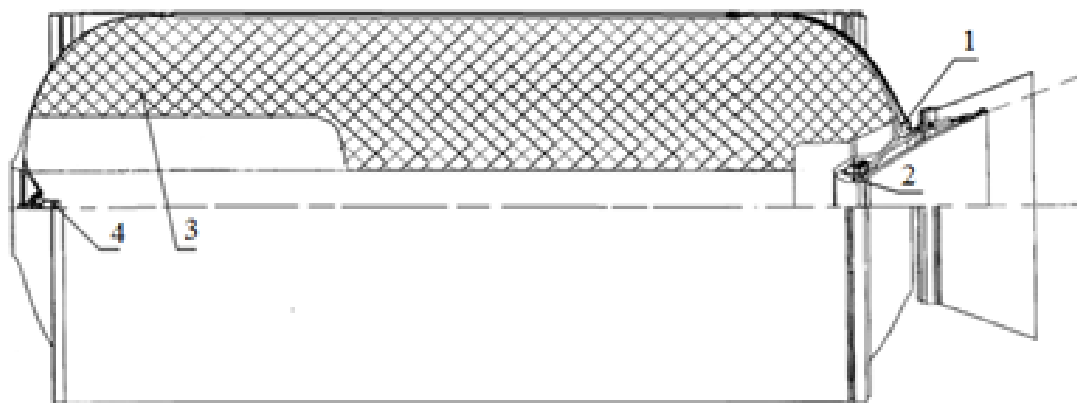
Обсуждение результатов численного анализа

Ниже приводятся результаты анализа параметров внутренней баллистики для двух типов ракетных двигателей твердого топлива – регулируемого (рисунок 2а) и маршевого (рисунок 2б).



а

1–корпус двигательной установки; 2–воспламенительное устройство; 3–топливный заряд, 4–газоход; 5–сопловые блоки; 6–вал регулятора расхода



б

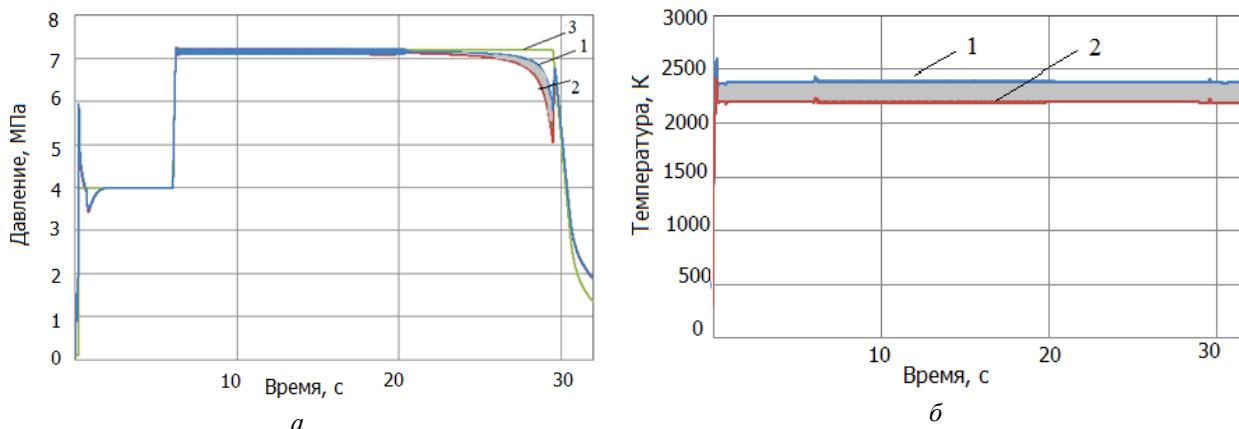
1–корпус ДУ; 2–сопловой блок; 3–топливный заряд; 4–инициирующее устройство

а – регулируемый двигатель; б – маршевый двигатель

Рисунок 2 – Конструктивные схемы РДТТ

Математическая модель процессов в регулируемом РДТТ приводится в работах [18,19]. Результаты расчетов типового двигателя массой до 50 кг и временем работы до 35 с представлены на рисунке 3. Расчеты, выполненные в варианте химически равновесного

состава продуктов сгорания, обозначены цифрой 1, в варианте химически инертного состава – цифрой 2. В РДТТ в качестве воспламенительного состава используется трубчатая шашка с забронированными торцами, выполненная из топлива с условной формулой вида $H_a O_b C_c N_d S_f K_g$. Твердое топливо смесевое безметальное низкотемпературное, условная формула которого имеет вид $C_h H_m O_r N_t Cl_q$. Программный режим на рисунке 3 обозначен цифрой 3 и соответствует работе двигателя на двух уровнях давления – 4,0 МПа и 7,0 МПа.



a – давление продуктов сгорания; b – температура в камере
1 – равновесное течение; 2 – замороженная смесь; 3 – программное давление;

Рисунок 3 – Зависимости давления и температуры в камере сгорания регулируемого РДТТ

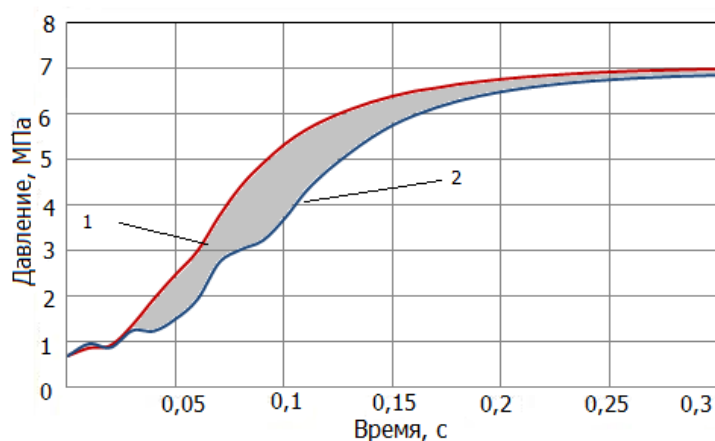
Анализ представленных на рисунке 3 результатов позволяет сделать следующие выводы:

- на этапе выхода двигателя на режим заметных отличий кривых $p(t)$ для давления в камере сгорания двигателя, полученных при использовании обеих моделей, не наблюдается;
- система регулирования обеспечивает значения давления в камере сгорания на программном уровне (кривая 3). Заметное отличие давлений (до 5% и более) наблюдается лишь на переходных режимах на заключительном этапе работы РДТТ. Время переходных процессов, в течение которого происходит приведение давления в камере сгорания регулируемого двигателя к запрограммированному режиму, не превосходит 0,7...0,8 с.
- отличие значений температуры, получаемое при решении задачи внутренней баллистики по моделям нереагирующей и химически равновесной смеси, практически значимо. Анализ показывает, что отличие температур в сравниваемых расчетах может достигать 10% и более.

Математическая модель внутрикамерных процессов в маршевом РДТТ (рисунок 2б) существенно отличается от модели работы регулируемого двигателя. В частности, внутрикамерные процессы следует рассматривать в газодинамической постановке (ниже используется одномерное по пространству распределение внутрибаллистических параметров), нет необходимости регулировать уровень рабочего давления в камере РДТТ

и т.п. Представленные ниже результаты выполнены по математическим моделям [2]. При проведении расчетов полагалось, что первоначальное давление в камере сгорания РДТТ составляет 0,7 МПа. Длина центрального канала двигателя 3 м, диаметр 1,5 м. Анализ выполнен для топлива, температура продуктов сгорания которого составляет 3200 К. В расчетах выполнялось разбиение канала заряда на 200 расчетных объемов, решение газодинамической задачи выполнялось методом крупных частиц с учетом модификаций, предложенных в [2,10]. Расчет химически равновесного состава продуктов сгорания осуществлялся на каждом шаге по времени и в каждом из выделенных объемов. На ПЭВМ средней производительности такой расчет выполнялся более 50 часов.

На рисунке 4 приводятся результаты расчетов давления как функции времени в переднем объеме камеры сгорания.



1 – модель химического равновесия; 2 – модель химически инертных продуктов сгорания

Рисунок 4 – Зависимость давления в камере сгорания от времени

Кривая 1 на рисунке 4 соответствует расчету начального этапа работы РДТТ (соответствует времени от 0 до 0,3 с) в режиме химически равновесного состава продуктов сгорания, а кривая 2 – расчету химически инертного состава. Как и следовало ожидать, выход РДТТ на режим квазистационарной работы при использовании моделей химически равновесного состава продуктов сгорания происходит более динамично и за меньшее время. Серия выполненных расчетов показывает, что отличие кривых 1 и 2 тем больше, чем выше температура продуктов сгорания твердого топлива. Следует дополнительно отметить, что для рассматриваемого варианта маршевого РДТТ кривая 2 в большей степени соответствует экспериментальным результатам.

Заключение

По результатам выполненных исследований можно сделать следующие выводы:

- применение моделей химически равновесного и химически инертного состава продуктов сгорания целесообразно при решении задач внутренней баллистики, так как позволяет установить границы изменения основных характеристик РДТТ, внутри которых

размещаются их фактические значения. Точные значения характеристик можно установить, решая задачу внутренней баллистики как задачу химической кинетики;

- в задачах о работе регулируемых РДТТ целесообразно использовать модели химически инертных продуктов сгорания, и это обусловлено относительно невысокой температурой продуктов сгорания твердого топлива (не более 2500 К);

- в задачах о выходе на режим маршевых РДТТ отличие результатов, получаемых по моделям инертной и химически равновесной смеси продуктов сгорания, заметно возрастает с ростом температуры продуктов сгорания твердого топлива;

- продолжительность расчета задачи внутренней баллистики с определением химически равновесного состава продуктов сгорания весьма трудоемка. Сократить время расчета при использовании такой постановки можно, предварительно насчитав термодинамические характеристики для значений давления и массовых концентраций состава продуктов сгорания топлива в камере, а затем, проаппроксимировав их полиномами, например, первого или второго порядка.

Список литературы

1. Алиев А.В. и др. Внутренняя баллистика РДТТ / под ред. А.М. Липанова, Ю.М. Милехина; РАРАН. М.: Машиностроение, 2007. 504 с.
2. Липанов А.М., Бобрышев В.П., Алиев А.В. и др. Численный эксперимент в теории РДТТ. Екатеринбург: Наука, 1994. 303 с.
3. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / пер. с англ. Г.Л. Агафонова; под ред. П.А. Власова. М.: Физматлит, 2003. 352 с. [Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Springer Berlin Heidelberg, 2001. DOI: [10.1007/978-3-662-04508-4](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04508-4)]
4. Физико-химические процессы в газовой динамике. Т. 1 / Под ред. Г.Г. Черного, С.А. Лосева. М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 1995.
5. Бочков М.В., Ловачев Л.А., Четверушкин Б.Н. Химическая кинетика образования NO_x при горении метана в воздухе // Математическое моделирование, 1992. Т. 4, № 9. С. 3-36.
6. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П. Теория ракетных двигателей. М.: Машиностроение, 1980. 464 с.
7. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергосиловых установках. М.: Наука, 1989. 285 с.
8. Бурдюгов С.И., Корепанов М.А., Кузнецов Н.П. и др. Утилизация твердотопливных ракетных двигателей. М.; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2008. 512 с.

9. Программа «Термодинамика» // Каталог инновационных разработок Ижевского государственного технического университета. 2-е изд., доп. и перераб. Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2001. С. 95.
10. Алиев А.В., Мищенко О.М. Математическое моделирование в технике. М.; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2012. 476 с.
11. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений: пер. с англ. М.: Мир, 1984. 333 с.
12. Воеводина О.А., Мищенко О.В. Программа для расчета равновесного состава продуктов сгорания органического топлива с применением LU- метода и QR- метода: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014618276 РФ. 2014.
13. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. М.: Наука, 2002. 184 с.
14. Соркин Р.Е. Газодинамика ракетных двигателей на твердом топливе. М.: Наука, 1967. 368 с.
15. Тенев В.А., Якимович Б.А. Генетические алгоритмы в моделировании систем. Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2010. 308 с.
16. Воеводина О.А., Мищенко О.В. Программа для расчета равновесного состава продуктов сгорания органического топлива с применением генетического алгоритма: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014618275 РФ. 2014.
17. Алиев А.В. Пакет прикладных программ «Твердотопливный двигатель» // Каталог инновационных разработок Ижевского государственного технического университета. Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2001. С. 24.
18. Соломонов Ю.С., Липанов А.М., Алиев А.В., Дорофеев А.А., Черепов В.И. Твердотопливные регулируемые двигательные установки / РАРАН. М.: Машиностроение, 2011. 416 с.
19. Алиев А.В., Лошкарёв А.Н., Черепов В.И. Математическая модель работы регулируемого РДТТ // Химическая физика и мезоскопия. 2006. Т. 8, № 3. С. 311-320.

Models of Non-Stationary Thermodynamic Processes in Rocket Engines Taking into Account a Chemical Equilibrium of Combustion Products

A.V. Aliev^{1,*}, O.A. Voevodina¹,
E.S. Pushina¹

* aliev@istu.ru

¹Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Izhevsk, Russia

Keywords: rocket engine, propellant, chemical equilibrium, internal ballistics, QR method, genetic algorithm

The paper considers the two approach-based techniques for calculating the non-stationary intra-chamber processes in solid-propellant rocket engine (SPRE). The first approach assumes that the combustion products are a mechanical mix while the other one supposes it to be the mix, which is in chemical equilibrium. To enhance reliability of solution of the intra ballistic tasks, which assume a chemical equilibrium of combustion products, the computing algorithms to calculate a structure of the combustion products are changed. The algorithm for solving a system of the nonlinear equations of chemical equilibrium, when determining the iterative amendments, uses the orthogonal QR method instead of a method of Gauss. Besides, a possibility to apply genetic algorithms in a task about a structure of combustion products is considered.

It is shown that in the tasks concerning the prediction of non-stationary intra ballistic characteristics in a solid propellant rocket engine, application of models of mechanical mix and chemically equilibrium structure of combustion products leads to qualitatively and quantitatively coinciding results. The maximum difference in parameters is 5-10%, at most. In tasks concerning the starting operation of a solid sustainer engine with high-temperature products of combustion difference in results is more essential, and can reach 20% and more.

A technique to calculate the intra ballistic parameters, in which flotation of combustion products is considered in the light of a spatial statement, requires using the high-performance computer facilities. For these tasks it is offered to define structure of products of combustion and its thermo-physical characteristics, using the polynoms coefficients of which should be predefined.

References

1. Aliev A.V. et al. *Vnutrennyaya ballistika RDTT* [Internal ballistics of Solid Propellant Rocket Engines]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2007. 504 p. (in Russian).

2. Lipanov A.M., Bobryshev V.P., Aliev A.V. et al. *Chislennyi eksperiment v teorii RDTT* [Numerical experiment in the theory of Solid Propellant Rocket Engines]. Ekaterinburg, Nauka Publ., 1994. 303 p. (in Russian).
3. Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer Berlin Heidelberg, 2001. DOI: [10.1007/978-3-662-04508-4](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04508-4) (Russ. ed.: Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. *Gorenie fizicheskie i khimicheskie aspekty, modelirovanie, eksperimenty, obrazovanie zagryaznyayushchikh veshchestv*. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 352 p.).
4. Chernyi G.G., Losev S.A., eds. *Fiziko-khimicheskie protsessy v gazovoi dinamike. T. 1* [Physical and chemical processes in gas dynamics. Vol. 1]. Moscow, MSU Publ., 1995. (in Russian).
5. Bochkov M.V., Lovachev L.A., Chetverushkin V.N. Chemical kinetics of NO_x formation in methane-air combustion. *Matematicheskoe modelirovanie*, 1992, vol. 4, no. 9, pp. 3-36. (in Russian).
6. Alemasov V.E., Dregalin A.F., Tishin A.P. *Teoriya raketnykh dvigatelei* [Theory of rocket engines]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1980. 464 p. (in Russian).
7. Alemasov V.E., Dregalin A.F., Kryukov V.G., Naumov V.I. *Matematicheskoe modelirovanie vysokotemperaturnykh protsessov v energosilovykh ustanovkakh* [Mathematical modeling of high-temperature processes in power installations]. Moscow, Nauka Publ., 1989. 285 p. (in Russian).
8. Burdyugov S.I., Korepanov M.A., Kuznetsov N.P. et al. *Utilizatsiya tverdotoplivnykh raketnykh dvigatelei* [Utilization of solid propellant rocket engines]. Moscow; Izhevsk, Institute of Computer Science Publ., 2008. 512 p. (in Russian).
9. Program "Termodinamics". *Katalog innovatsionnykh razrabotok Izhevskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Catalog of innovative development of Izhevsk State Technical University]. Izhevsk, IzhSTU Publ., 2001, p. 95. (in Russian).
10. Aliev A.V., Mishchenkova O.M. *Matematicheskoe modelirovanie v tekhnike* [Mathematical modeling in engineering]. Moscow; Izhevsk, Institute of Computer Science Publ., 2012. 476 p. (in Russian).
11. George J.A., Liu J.W.-H. *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems*. Prentice-Hall, 1981. (Russ. ed.: George J.A., Liu J.W.-H. *Chislennoe reshenie bol'shikh razrezhennykh sistem uravnenii*. Moscow, Mir Publ., 1984. 333 p.).
12. Voevodina O.A., Mishchenkova O.V. *Programma dlya rascheta ravnovesnogo sostava produktov sgoraniya organicheskogo topliva s primeneniem LU- metoda i QR- metoda* [The program for calculation of equilibrium structure of products of combustion of organic fuel with application of LU method and QR method]. Certificate RF of state registration of computer program, no. 2014618276, 2014. (in Russian, unpublished).

13. Belov G.V. *Termodinamicheskoe modelirovanie: metody, algoritmy, programmy* [Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs]. Moscow, Nauka Publ., 2002. 184 p. (in Russian).
14. Sorkin R.E. *Gazodinamika raketnykh dvigatelei na tverdom toplive* [Gas dynamics of solid propellant rocket engines]. Moscow, Nauka Publ., 1967. 368 p. (in Russian).
15. Tenenev V.A., Yakimovich B.A. *Geneticheskie algoritmy v modelirovanii sistem* [Genetic algorithms in modeling of systems]. Izhevsk, IzhSTU Publ., 2010. 308 p. (in Russian).
16. Voevodina O.A., Mishchenkova O.V. *Programma dlya rascheta ravnovesnogo sostava produktov sgoraniya organicheskogo topliva s primeneniem geneticheskogo algoritma* [The program for calculation of equilibrium structure of products of combustion of organic fuel with application of genetic algorithm]. Certificate RF of state registration of computer program, no. 2014618275, 2014. (in Russian, unpublished).
17. Aliev A.V. Applied programs "Solid propellant engines". *Katalog innovatsionnykh razrabotok Izhevskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Catalog of innovative development of Izhevsk State Technical University]. Izhevsk, IzhSTU Publ., 2001, p. 24. (in Russian).
18. Solomonov Yu.S., Lipanov A.M., Aliev A.V., Dorofeev A.A., Cherepov V.I. *Tverdotoplivnye reguliruemye dvigatel'nye ustanovki* [Regulable solid propellant rocket engines]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2011. 416 p. (in Russian).
19. Aliev A.V., Loshkarev A.N., Cherepov V.I. Mathematical model of work of regulable Solid Propellant Rocket Engines. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya = Chemical physics and mesoscopy*, 2006, vol. 8, no. 3, pp. 311-320. (in Russian).