

火箭-冲压发动机和火箭 发动机的热力计算

罗文明 陈为雄 张涵美

摘 要

本文介绍火箭——冲压发动机和火箭发动机的热力计算方法。其中燃烧计算采用改进的怀特法，考虑了气相和凝相组分。平衡组分初值可以任意选取，没有负值组分修正问题。经过计算多种不同类型的贫氧推进剂，证明本方法计算可靠，收敛迅速、有较大的通用性。可在国产中小型计算机上实现火箭——冲压发动机和火箭发动机的热力计算。

一、前 言

火箭——冲压发动机利用燃气发生器排出的贫氧燃气作为燃料，用空气中的氧作为氧化剂在冲压补燃室中进行补充燃烧。这种发动机的比冲高于固体火箭，而推力系数高于普通冲压发动机。

在火箭——冲压发动机研制过程中，热力计算是很重要的一环。

首先要对选择的推进剂进行性能计算，以便评价和鉴别，选择合适的配方。

其次，对给定的推进剂在燃气发生器和火箭——冲压发动机各种工作条件下进行热力计算，计算出燃烧室和尾喷管出口处的燃烧产物的温度、成分和其他热力参数，为发动机性能计算、传热计算提供数据。另外，在火箭——冲压发动机试验时，发动机的热力计算也是不可缺少的，它起着重要的指导作用。

迄今为止，很少见到有关火箭——冲压发动机的热力计算和程序方面的资料。为了适应研制的需要，我们编制了这种类型的发动机的热力计算方法。其中关于平衡组分的计算是在怀特法的基础上作了一些改进，使初始平衡组分可以任意选取，不必事先满足物质平衡方程，气相组分采用对数修正，避免了负值的出现，加快了计算速度，从而使该法适用于计算有大量凝相产物和产物相态发生变化的贫氧推进剂。

我们已经在DJS-6机上编制了一个热力计算通用程序，该程序可连续计算火箭——冲压发动机在一系列配方和各种工况下的热力参数。

二、计 算 假 设

为了进行火箭——冲压发动机和火箭发动机的热力计算采用下列简化假设：

1. 燃气中存在凝相产物时，假设燃气仍然遵守理想气体状态方程；
2. 凝相组分在各处都和气态组分有着相同的温度和速度；
3. 相态不同的同一化学组成当作不同成分来处理；

4. 每种凝相组分只能选定一种状态或是固态或是液态, 且都看成是一种纯物质。

三、方法概要

1. 求推进剂的假定化学式及总焓

在进行发动机热力计算时, 用一公斤推进剂作为计算单位, 设推进剂中有 j 种组元, m 种化学元素, 则一公斤推进剂中各元素的克原子数为

$$b_i = \sum_{j=1}^{jj} \left(g_j \times 1000 \times PCF_{ij} / \sum_{i=1}^m PCF_{ij} \times AQ_i \right) \quad (1)$$

式中:

g_j ——为一公斤推进剂中 j 组元的重量百分数;

PCF_{ij} ——为 j 组元中第 i 种元素的原子数;

AQ_i ——为第 i 种元素的原子量。

一公斤推进剂的总焓 HPI 按下式计算

$$HPI = \sum_{j=1}^{jj} HP_j \times g_j \quad (2)$$

其中

$$HP_j = HP_j^\circ + C_j(T_j - 298.16) + \Delta HP_j$$

HP_j° 为 j 组元在基准压力和基准温度下的总焓;

C_j 、 ΔHP_j 为 j 组元的比热, 相变热;

T_j 推进剂的初温。

在进行火箭——冲压发动机热力计算时, 需要计入由进气道进入补燃室的空气。

假设进入补燃室的空气流量 G_B 和推进剂流量 G_T 之比为 n , n 称为引射系数, 它等于 αL_o 。

这里, α 为余气系数, L_o 为燃烧一公斤推进剂所需的理论空气量, 则 $(1+n)$ 公斤燃料中各元素的克原子数为

$$\begin{cases} b_1^0 = b_1 + 232 \times n / 16 \\ b_2^0 = b_2 + 768 \times n / 14 \\ b_i^0 = b_i \quad i = 3, 4, 5, \dots, m \end{cases} \quad (3)$$

这里规定 b_1 和 b_2 分别为氧和氮的克原子数。

燃料总焓 HP 应等于

$$HP = HPI + n \times I_{HS} \quad (4)$$

式中 I_{HS} 表示一公斤空气的总焓, 它是温度的函数。

当 $n = 0$ 时, 则 $HP = HPI$, 此种情况即为计算火箭发动机或燃气发生器中热力参数的情况。

2. 用拟合多项式计算热力学函数

为便于在电子计算机上应用, 总焓 H_T^0 , 熵 S_T^0 , 比热 C_p 的计算, 采用近似多项式以代替热力学函数表, 其形式如下:

$$\frac{H_T^0}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (5)$$

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (6)$$

$$\frac{S_T^0}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 \quad (7)$$

H_T^0 、 S_T^0 的右上标0是指标准状态，表示压力为一个物理大气压；下标T是指温度。

其中系数 $a_1, a_2, \dots, a_7$ 取自资料(3)，对于每种平衡组分有两组相应于温度300~1000 K和1000~5000 K的系数； $\bar{R} = 1.98726$ 卡/克分子度。

3. 确定平衡组分

假设燃烧产物系统中有m种化学元素，n个气相组分，p个凝相组分。自由能为广延量，具有可加性，所以系统的自由能可表示为

$$F(X) = \sum_{i=1}^{n+p} f_i(X) \quad (8)$$

其中 X 为 $(X_1, X_2, X_3, \dots, X_{n+p})$ 一组平衡组分克分子数；

$X_1, X_2, \dots, X_n$ 表示气相组分；

$X_{n+1}, X_{n+2}, \dots, X_{n+p}$ 表示凝相组分。

第i种燃气成分的自由能 $f_i(X)$ 为

$$f_i(X) = \begin{cases} X_i(C_i + \ln X_i - \ln \bar{X}) & i = 1, 2, \dots, n \\ X_i C_i & i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \quad (9)$$

$$C_i = \begin{cases} \frac{F_i^0}{\bar{R} T} + \ln P & i = 1, 2, \dots, n \\ \frac{F_i^0}{\bar{R} T} & i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \quad (10)$$

$$\frac{F_i^0}{\bar{R} T} = \frac{1}{\bar{R}} \left(\frac{H_i^0}{T} - S_i^0 \right) \quad i = 1, 2, \dots, n+p \quad (11)$$

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^n X_i \quad (12)$$

式中 $f_i(X)$ 、 F_i^0 、 X_i 为第i种组分的自由能，标准自由能及克分子数；

P 、 T 为系统的压力和温度；

$\bar{X}$ 为燃烧系统气态组分的总克分子数。

当系统处于平衡状态时，其自由能函数为最小。

确定化学系统平衡组分相当于求一组没有负值的 X_i ，使(8)式为最小，且满足物质守恒方程。

$$\sum_{i=1}^{n+p} a_{ij} X_i = b_j^0 \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (13)$$

式中： a_{ij} 为第i种组分中j元素的克原子数。

任意选择一组正值组分 $y_1, y_2, \dots, y_{n+p}$ ，则产物的总自由能为

$$F(y) = \sum_{i=1}^n y_i (C_i + \ln y_i - \ln \bar{y}) + \sum_{i=n+1}^{n+p} C_i y_i \quad (14)$$

其中 $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i$

未知量 $\bar{X}_i$, $\bar{X}$ 由物质守恒方程(13)和自由能函数 $F(X)$ 为最小确定。为此, 将 $F(X)$ 在 y 处按台劳级数展开, 并取展开式的前三项 $Q(X)$ 作为 $F(X)$ 的近似值。

$$Q(X) \approx F(y) + \sum_{i=1}^{n+p} \frac{\partial F}{\partial X_i} \bigg|_{X=Y} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n+p} \sum_{k=1}^{n+p} \frac{\partial^2 F}{\partial X_i \partial X_k} \bigg|_{X=Y} \Delta_i \Delta_k \quad (15)$$

由(9)式可得

$$\frac{\partial F}{\partial X_i} = \begin{cases} C_i + \ln X_i - \ln \bar{X} & i = 1, 2, \dots, n \\ C_i & i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial X_i \partial X_k} = \begin{cases} \frac{\delta_{ik}}{X_i} - \frac{1}{\bar{X}} & \text{如果 } i \leq n \text{ 及 } k \leq n \\ 0 & \text{如果 } i > n \text{ 或 } k > n \end{cases} \quad (17)$$

式中 δ_{ik} 为克朗奈克尔 δ , 即

$$\begin{aligned} \text{当 } i = k \text{ 时} & \quad \delta_{ik} = 1; \\ i \neq k \text{ 时} & \quad \delta_{ik} = 0. \end{aligned}$$

最后得到

$$Q(X) = F(y) + \sum_{i=1}^n (C_i + \ln y_i - \ln \bar{y}) \Delta_i + \sum_{i=n+1}^{n+p} C_i \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta_i}{y_i} - \frac{\bar{\Delta}}{\bar{y}} \right) \Delta_i \quad (18)$$

$$\sum_{i=1}^{n+p} a_{ij} \Delta_i = b_j^0 - b_j', \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (19)$$

$$b_j' = \sum_{i=1}^{n+p} a_{ij} y_i \quad (13)'$$

y_i 虽不满足物质守恒方程, 但 X_i 却满足物质守恒方程(13)。

用怀特法进行热力计算, 由于假设的平衡组分的初值的不良估计, 在迭代初期往往出现负值组分, 需要进行修正, 使其转化为正值, 为了克服修正负组分的麻烦, 我们对法作了修改, 对气态组分采用对数修正, 避免了负值的出现。凝相组分采用线性修正。

$$\begin{aligned} \text{令 } \delta_i &= \begin{cases} \ln X_i - \ln y_i & i = 1, 2, \dots, n \\ X_i - y_i & i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \\ \delta &= \ln \bar{X} - \ln \bar{y} \end{aligned} \quad (20)$$

展开(20)式并忽略二阶以上微量, 得

$$\begin{aligned} \delta_i &= \begin{cases} \ln \frac{X_i}{y_i} \approx \frac{\Delta_i}{y_i} & i = 1, 2, \dots, n \\ \Delta_i & i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \\ \delta &= \ln \frac{\bar{X}}{\bar{y}} \approx \frac{\bar{\Delta}}{\bar{y}} \end{aligned} \quad (21)$$

将(21)式代入(18)式得

$$Q(X) \approx F(y) + \sum_{i=1}^n (C_i + \ln y_i - \ln \bar{y}) y_i \delta_i + \sum_{i=n+1}^{n+p} C_i \delta_i$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n y_i \delta_i (\delta_i - \delta) \quad (22)$$

改写(19)式为

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} y_i \delta_i + \sum_{i=n+1}^{n+p} a_{ij} \delta_i - \Delta b_j = 0 \quad (19)'$$

为了求X, 使Q(X)最小, 且满足条件(19)', 可以定义函数G(X)。

$$G(X) = Q(X) + \sum_{j=1}^m \pi_j (\Delta b_j - \sum_{i=1}^n a_{ij} y_i \delta_i - \sum_{i=n+1}^{n+p} a_{ij} \delta_i) \quad (23)$$

式中 π_i 为拉格朗日因子。

于是, 系统自由能最小的条件为

$$\frac{\partial G}{\partial \delta_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n+p,$$

由此得到:

$$\begin{cases} \delta_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} \pi_j + \delta - (C_i + l_n y_i - l_n \bar{y}) \\ \quad i = 1, 2, \dots, n \\ C_i = \sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij} \quad i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \quad (24)$$

$$\text{令 } \beta_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} y_i \quad (25)$$

$$\gamma_{jk} = \gamma_{kj} = \sum_{i=1}^n a_{ij} a_{ik} y_i \quad (26)$$

经整理后, 得到修正的怀特法的基本方程

$$\begin{cases} \beta_j \delta + \sum_{i=n+1}^{n+p} a_{ij} \delta_i + \sum_{k=1}^m \gamma_{kj} \pi_k = \Delta b_j + \sum_{i=1}^n a_{ij} f_i(\bar{y}) \\ \quad j = 1, 2, \dots, m \\ \left(\sum_{i=1}^n y_i - \bar{y} \right) \delta + \sum_{j=1}^m \beta_j \pi_j = \sum_{i=1}^n f_i(\bar{y}) - \left(\sum_{i=1}^n y_i - \bar{y} \right) \\ \sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij} = C_i \quad i = n+1, n+2, \dots, n+p \end{cases} \quad (27)$$

解此线性方程组, 得到凝相组分的修正 $\delta_{n+1}, \delta_{n+2}, \dots, \delta_{n+p}$ 以及m个拉格朗日因子 $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_m$ 及 δ , 将所得结果代入(24)式, 得到气相组分的修正值, 从而求出气相组分

$$\begin{cases} X_i = e^{ln X_i} \quad i = 1, 2, \dots, n \\ \bar{X} = e^{ln \bar{X}} \end{cases} \quad (28)$$

由于气相组分采用对数修正, 所以解出的所有气态组分均为正值。如果计算出的凝相组分为负值, 则凝相在平衡组分中不存在。

4. 定压燃烧温度及其他热力参数的确定

假设燃烧过程中没有能量损失, 根据能量守恒定律, 推进剂的生成焓和进入冲压补燃室的空气总焓之和应等于补燃室中燃气总和。

$$\text{即 } HP = HPI + n \times I_{HS} = \sum_{i=1}^{n+p} X_i H_i^0(T) \quad (29)$$

$$\text{令 } HC = \sum_{i=1}^{n+p} X_i H_i^0(T)$$

HC为假设温度下计算得到的冲压补燃室或燃烧室中燃气总焓，计算时先预估一个温度，求出燃烧产物的平衡组分 X_i 及HC，然后与输入的能量HP进行比较，实践证明，对于贫氧推进剂，用线性内插法求出的燃烧温度将导致较大的误差。我们在计算中采用三点插值法，至少计算三个温度下的平衡组分，其温度间隔为100K，得到焓值 HC_1, HC_2, HC_3 。如果HP在 HC_1 和 HC_3 之间，则用此三点的拟合曲线代替总焓与温度间的实际曲线，然后根据 $HC = HP$ 的条件，由拟合曲线求出燃烧温度T，再计算出此温度下的平衡组分和焓，如果焓的精度达不到要求，则继续采用三点插值法，直到满足精度要求为止。由于采用二次曲线的拟合，且温度间隔逐渐缩小，因此收敛速度颇为迅速，通常用二、三次插值后，就可以使焓值相对误差小于十万分之一。

求出燃烧温度 T_c 及其平衡组分 X_i 后，就可以计算出其他热力参数。考虑到燃烧产物中有凝相物质，在燃烧产物热力参数计算中应作相应的修正。

凝相产物的重量百分数

$$\varepsilon_c = \frac{1}{1000} \sum_{i=n+1}^{n+p} X_i M_i \quad (30)$$

M_i 为一公斤燃烧产物中第i种凝相产物的分子量。

气相产物的平均分子量 $\overline{M}_c^g$ 及气体常数 $\overline{R}_c^g$ 为

$$\overline{M}_c^g = 1000(1 - \varepsilon_c) / \overline{X}_c \quad (31)$$

$$\overline{R}_c^g = 848 / \overline{M}_c^g \quad (32)$$

含凝相产物的平均气体常数 $\overline{R}_c$ 为

$$\overline{R}_c = (1 - \varepsilon_c) \overline{R}_c^g \quad (33)$$

燃烧产物的定压比热 $\overline{C}_{pc}$ ，定容比热 $\overline{C}_{vc}$ 及比热比 $\overline{K}_c$ 分别按下式计算：

$$\overline{C}_{pc} = \sum_{i=1}^{n+p} X_i C_{pi} \quad (34)$$

$$\overline{C}_{vc} = \overline{C}_{pc} - \overline{R}_c / 427 \quad (35)$$

$$\overline{K}_c = \frac{\overline{C}_{pc}}{\overline{C}_{vc}} \quad (36)$$

燃烧产物熵的计算：

$$S_c = \sum_{i=1}^{n+p} X_i S_i^0 - 1.98726 \sum_{i=1}^n X_i \ln \frac{X_i}{\overline{X}} - 1.98726 \overline{X} \ln P \quad (37)$$

喷管的热力计算是在燃烧室热力计算基础上进行的。其计算方法与燃烧室热力计算方法相同，类别是用熵相等关系来代替焓相等来计算热力参数。这一点上，这里不再重复叙述。

5. 火箭发动机理论性能参数计算

喷管出口处燃烧产物的速度 V_e 。

$$V_e = \sqrt{\frac{2g}{A}(HC - H_e)} \quad (38)$$

理论比冲 I_s

$$I_s = \frac{V_e}{g} + \frac{\bar{R}_e T_e}{V_e P_e} (P_e - P_a) \quad (39)$$

理论特征速度 C^*

$$C^* = \frac{\sqrt{g \bar{R}_e T_e}}{\Gamma} \quad (40)$$

$$\Gamma = \sqrt{\bar{K}_e} \left(\frac{2}{\bar{K}_e + 1} \right)^{\frac{\bar{K}_e + 1}{2(\bar{K}_e - 1)}}$$

理论推力系数 C_F

$$C_F = \frac{I_s \cdot g}{C^*} \quad (41)$$

四、计 算 步 骤

1. 给定推进剂的配方, 计算推进剂完全燃烧时所需的理论空气量 L_0 及燃料低热值 H_u ;
2. 计算一公斤推进剂中各元素的克原子数以及在给定余气系数 α 下计算 $1 + \alpha L_0$ 公斤燃气中各元素的克原子数。按(1)和(3)式计算;
3. 任意假设一组平衡组成, 开始先考虑气相组分, 例如取
气相组分 $X_j = \frac{20}{n} \quad j = 1, 2, \dots, n$
凝相组分 $X_j = 0 \quad j = n+1, n+2, \dots, n+p$
4. 按公式(5)和(7)计算每种燃烧产物的焓和熵;
5. 按公式(8)、(9)、(10)、(11)计算各组分的自由能和系统的自由能;
6. 按公式(25)、(26)计算常数 β_j 、 γ_{kj} ;
7. 解线性方程组得到 m 个拉格朗日因子 $\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_m$ 及凝相组分 $\delta_{n+1}, \delta_{n+2}, \delta_{n+3}, \dots, \delta_{n+p}$ 及 δ ;
8. 按公式(24)求得气相组分的修正值 δ_i ;
9. 计算气相组分 X_j 及气相组分总克分子数 $\bar{X}$;
10. 重复计算直到相邻两次计算的平衡组成满足所要求的精度为止;
11. 逐个检验凝相组分是否存在, 每次取使自由能下降最大的一个凝相组分参加计算;
12. 计算火箭——冲压发动机和火箭发动机燃烧室热力参数。如凝相产物的重量百分数 ε_c , 气相产物的平均分子量 $\bar{M}_c^g$, 气体常数 $\bar{R}_c^g$ 以及整个燃烧产物的平均气体常数 $\bar{R}_c$ 和比热比 $\bar{K}_c$ 等;
13. 计算尾喷管出口处的热力参数;
14. 计算火箭发动机特征速度 C^* , 推力系数 C_F 及理论比冲 I_s 。

五、程序设计中有问题

1. 平衡组分初始值的选择

任意假设燃烧产物中气相组分的克分子数为 $\frac{20}{n}$, 而凝相各组分为零, 如此假设, 甚为

简单, 不需要满足物质守恒方程, 这样得到的初始组分, 虽为不良的起始估计, 但是经过几次迭代后, 可很快使平衡组分渐趋合理, 最后达到所需的精度。

2. 原始数据的自动形成

在进行发动机热力计算时以及进行推进剂配方筛选时, 为了有效和方便地进行计算, 采用通用程序是非常必要的, 在所使用计算机容量许可的情况下, 力求输入较多的原始数据, 以便在各种情况下均可使用。我们所编的程序对推进剂所含的组元数、元素总数以及燃烧产物中气相和凝相组分数等都不加限制, 解题能力仅受计算机容量的限制, 在程序中编制了一个原始数据压缩程序, 根据输入的推进剂的配方组成, 计算机将自动地对原始通用数据进行转换, 然后对转换数据进行鉴别和压缩处理, 自动形成计算某个特殊配方所需的原始数据, 因此可连续计算一系列配方和发动机在各种工作条件下的热力参数。

我们目前使用的程序包含14种化学元素、86种燃烧产物, 其中气相组分77种, 液相和凝相组分9种。

3. 收敛问题

在计算平衡组分时, 由于初始组分是任意假设的, 在迭代初期可能得到大的修正值, 如直接使用此值计算, 则可能导致发散, 因此采用控制因子 λ 来限制修正的大小。

根据文献(1)介绍的经验公式确定 λ 的数值, 计算结果证明能保证收敛。

当 $X_j \leq 10^{-12}$ 时, 则 $X_j = 10^{-12}$, $\lambda_j = 1 \quad j = 1, 2, \dots, n+p$

当 $\frac{X_j}{\bar{X}} > 10^{-8}$ 或 $\ln\left(\frac{X_j}{\bar{X}}\right) > -18.420681$ 和 $\Delta \ln X_j > 0$

则 λ_1 定义为

$$\lambda_1 = \frac{2}{\max(|\Delta \ln \bar{X}|, |\Delta \ln X_j|)} \quad (42)$$

$$j = 1, 2, \dots, n$$

当 $\ln\left(\frac{X_j}{\bar{X}}\right) \leq -18.420681$ 和 $\Delta \ln X_j > 0$ 的气相组分, 用 λ_2 来进行修正, 定义为

$$\lambda_2 = \min \left| \frac{-\ln\left(\frac{X_j}{\bar{X}}\right) - 9.2103404}{\Delta \ln X_j - \Delta \ln \bar{X}} \right| \quad (43)$$

$$j = 1, 2, \dots, n$$

在迭代时所采用的控制因子 λ , 根据 λ_1 和 λ_2 定义为

$$\lambda = \min(1, \lambda_1, \lambda_2) \quad (44)$$

当平衡组分远离平衡值时, λ 将远小于1, 随着迭代的继续, 燃气平衡组分逐渐接近平衡值时, λ 亦渐趋近于1, 其修正关系式如下:

$$\begin{cases} \ln X_j^{(i+1)} = \ln X_j^{(i)} + \lambda^{(i)} (\Delta \ln X_j)^{(i)} & j = 1, 2, \dots, n \\ X_j^{(i+1)} = X_j^{(i)} + \lambda^{(i)} \Delta X_j^{(i)} & j = n+1, \dots, n+p \\ \ln \bar{X}^{(i+1)} = \ln \bar{X}^{(i)} + \lambda^{(i)} (\Delta \ln \bar{X})^{(i)} \end{cases} \quad (45)$$

式中 上标 i 表示第 i 次估计

反复迭代直到平衡组分满足下列要求时为止。

$$\left| \frac{X_{j^{(1+1)}} - X_{j^{(1)}}}{\bar{X}} \right| \leq 10^{-6} \quad j = 1, 2, \dots, n+p \quad (46)$$

对于等压燃烧室的热力计算, 要求总焓满足下列关系式。即

$$\frac{H_c - H_p}{H_p} \leq 10^{-5} \quad (47)$$

对于喷管膨胀过程, 要求

$$\left| \frac{S_c - S_e}{S_e} \right| \leq 10^{-5} \quad (48)$$

4. 凝相组分的检验

根据计算时假设的温度 T , 很快就能判定某些凝相组分是否存在, 为此在程序中编制了一个判别式

$$F_T = |(M_T)_j + 10^{-8}| \quad (49)$$

$$MF = (M_T)_j \times (F_T - T) \quad (50)$$

式中 T —— 计算时假设的温度;

$(M_T)_j$ —— 第 j 种凝相组分的熔点温度, 规定固相取正号, 液相取负号。

当 $MF < 0$ 则自动除去该种物质, 不需要检验, 然后对剩下的凝相组分进行检验。

判别凝相组分存在的条件是

$$\frac{\partial f}{\partial X_j} = \left(\frac{F^\circ}{RT} \right)_j - \sum_{i=1}^n \pi_j \alpha_{ij} < 0 \quad (51)$$

逐个检验每种凝相组分, 取使自由能下降最大的那种凝相组分作为检验的平衡组分, 然后重新计算, 当收敛后, 该凝相组分仍为负值, 则删去此种物质, 继续检验其它凝相组分, 直到全部凝相组分检验完毕。

六、结 论

利用本方法曾对若干种固体贫氧推进剂进行了计算, 计算结果表明, 所提出的方法是切实可行的, 可用于火箭——冲压发动机及火箭发动机的热力计算。通过大量计算实践, 我们得出以下几点粗浅看法:

1. 贫氧推进剂燃烧平衡成份的确定是火箭——冲压发动机热力计算的工作量较大的环节。由于发动机工作压力低, 燃烧产物凝相含量高, 二次补充燃烧时有相态变化, 因此其计算较火箭推进剂复杂。

2. 在计算平衡组分时, 初始组分的选取不加任何限制; 气态组分采用对数修正; 先求出气相平衡组分, 然后再逐个检验凝相组分, 采取这些措施, 不仅能避免出现负凝相组分修正的麻烦, 而且还显著提高计算效率。

3. 贫氧推进剂的燃烧平衡组分和计算焓值随燃烧温度变化较急剧。因此采用线性插值误差较大, 采用二次插值法较为合适。

4. 编制热力计算通用程序, 对于贫氧推进剂和火箭——冲压发动机的研制具有重要的现实意义, 有利于多方案比较和优化设计。

参 考 文 献

- (1) Sanford Gordon and Bonnie J. McBride, Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflect shocks and Chapman-Jouguet detonation, NASA SP-273 1971.
- (2) Brank J. Zeleznic and Sanford Gordon, An analytical investigation of three general methods of calculating chemical equilibrium compositions, NASA TN D-473 september 1960.
- (3) Thermodynamic properties to 6000 K for 201 substances involving the first 18 element, NASA SP 3001 1963.
- (4) Williams etc., 固体推进剂火箭发动机的基本问题. 上册, 国防工业出版社, 1976年6月
- (5) 固体火箭发动机设计. 上册, 北京航空学院四〇三教研室, 1976年9月.
- (6) 推进剂性能计算的计算机程序. 西北工业大学科技资料, 1979年3月.