

## РАЗВИТИЕ СРЕДСТВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ Julia

Г.В. Белов

gbelov@yandex.ru

ОИВТ РАН, Москва, Российская Федерация

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Российская Федерация

---

### Аннотация

Приведен опыт разработки алгоритма и программы теплового расчета характеристик химико-термического ракетного двигателя. Программа написана на языке Julia. Для расчета равновесного состава продуктов сгорания использована свободно распространяемая библиотека Iprort. Программа сопряжена с базой данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ ИВТАНТЕРМО. Для удобства обработки информация о термодинамических свойствах хранится в двух текстовых файлах специального вида. При разработке программы использована простейшая модель рабочего процесса, в соответствии с которой поток является одномерным, течение продуктов адиабатическое, равновесное, потери на трение отсутствуют, скорость конденсированных частиц равна скорости газового потока. Приведены соотношения для расчета производных состава, а также равновесных значений теплоемкости и скорости звука. Текст программы можно использовать в учебном процессе, его нетрудно адаптировать для более сложных моделей рабочего процесса в ракетном двигателе. Результаты вычислений, полученные с использованием разработанной программы, находятся в хорошем соответствии с результатами расчетов программы ТЕРРА. Время выполнения одного расчета четырехэлементного топлива, который включает в себя определение характеристик продуктов сгорания в камере, критическом сечении и на срезе сопла, варьируется в диапазоне 3...5 с

### Ключевые слова

*Продукты сгорания, ракетное топливо, термодинамическое моделирование*

Поступила 09.02.2021

Принята 06.03.2021

© Автор(ы), 2021

**Введение.** Термодинамические расчеты равновесного состава и характеристик продуктов сгорания ракетных топлив являются важным этапом проектирования химико-термического ракетного двигателя.

Первые методы расчета термодинамических свойств продуктов сгорания [1–3] не были предназначены для расчетов на компьютере. Для расчета равновесного состава использовались константы равновесия химических реакций.

Вероятно, первая программа расчета равновесного состава и характеристик продуктов сгорания ракетного топлива была создана в США [4]. Отметим, что до создания этой программы соответствующие расчеты на настольных калькуляторах занимали несколько дней [5, 6].

В СССР компьютеры получили распространение несколько позже, соответствующая программа для расчета характеристик продуктов сгорания ракетных топлив также была создана позднее. В справочнике [7] описаны метод, алгоритм и программа расчета равновесного состава и свойств продуктов сгорания ракетных топлив. Приведена ссылка на отчет 1961 г., в котором для расчета состава продуктов сгорания также был использован метод констант равновесия. В 1962 г. была опубликована работа профессора МВТУ им. Н.Э. Баумана Г.Б. Синярёва [8], в которой предложен универсальный метод решения системы уравнений для определения равновесного состава рабочего тела. В трудах МВТУ № 268 [9] приведены метод, алгоритм и программа расчета равновесного состава и свойств продуктов сгорания ракетных топлив на языке АЛГОЛ. Из этой работы впоследствии вырос программный комплекс АСТРА, созданный профессором МВТУ им. Н.Э. Баумана Б.Г. Трусовым. Текст программы АСТРА на языке Fortran опубликован в монографии [10]. Программа АСТРА (и ее более современная версия ТЕРРА) широко использовалась для термодинамического расчета химико-термических ракетных двигателей. В сети Интернет широкое распространение получила версия программы СЕА [11].

Несмотря на наличие перечисленных программ расчета характеристик ракетных двигателей, время от времени возникает необходимость изменения модели исследуемого объекта. В этом случае желательно располагать максимально простой программой расчета термодинамического равновесия с открытым исходным кодом и удобной для использования человеком, который не является профессиональным программистом. В настоящей работе описан опыт создания программы термодинамического расчета химико-термических ракетных двигателей на языке программирования Julia с использованием библиотек Iprot [12] и JuMP [13].

**Термодинамическая модель.** Как правило, при термодинамическом расчете характеристик ракетного двигателя принимаются следующие допущения:

- поток одномерный;
- горение в камере сгорания происходит при постоянном давлении;
- энтальпия компонентов топлива ЖРД на входе в камеру сгорания равна их энтальпии при температуре хранения в баке;
- отсутствуют тепловые потери и потери на трение;
- течение продуктов сгорания по соплу является изоэнтропным;
- скорость конденсированных частиц равна скорости газа.

Для расчета основных характеристик ракетного двигателя необходимо определить равновесный состав и свойства продуктов сгорания в камере сгорания, в критическом сечении и на срезе сопла. Камеру сгорания можно рассматривать как адиабатический реактор проточного типа, поэтому расчет проводится при заданных значениях энтальпии и давления ( $H, p$ ). Параметры критического сечения определяются из условия равенства скоростей потока  $W$  и местной скорости звука  $a$  в предположении, что энтропия потока имеет такое же значение, как в камере сгорания ( $S = S_2^*, p(W = a)$ ). Параметры на срезе сопла вычисляются для заданных значений энтропии и давления ( $S = S_2^*, p_a$ ). Таким образом, основной задачей термодинамического расчета характеристик ракетного двигателя является определение состава продуктов сгорания. Алгоритм расчета равновесного состава многокомпонентных гетерогенных термодинамических систем при заданных значениях температуры и давления с использованием языка программирования Julia и библиотеки Ipopt приведен в [14].

**Расчет состава для случая, когда температура не задана.** Для расчета параметров равновесного состава в случае незаданной температуры необходимо найти корень нелинейного уравнения вида

$$f(x) - a = 0.$$

Для решения этой задачи используется метод Ньютона, в соответствии с которым корень уравнения определяется итерационно:

$$x_{i+1} \approx x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}.$$

1. Если задано значение энтальпии  $H$ , то температура определяется по формуле

$$T_{i+1} \approx T_i + \frac{H - H(T_i)}{C_p(T_i)}.$$

2. Если задано значение энтропии  $S$ , то

$$T_{i+1} \approx T_i \left( 1 + \frac{S - S(T_i)}{C_p(T_i)} \right).$$

Алгоритм расчета равновесной теплоемкости  $C_p(T)$ , которая используется в приведенных соотношениях, приведен далее.

**Соотношения для расчета параметров критического сечения сопла.** Предположим, что течение продуктов сгорания является изоэнтропным, при этом энтропия продуктов сгорания в каждом сечении сопла равна их энтропии в камере сгорания  $S_2^*$ . Параметры критического сечения сопла определяются из условия равенства скоростей потока и местной скорости звука. Решение находится итерационно путем многократного определения равновесного состава продуктов сгорания при заданных значениях энтропии и давления. Энтропия постоянна, а давление варьируется следующим образом [11].

Начальное приближение для расчета критического давления определяется из соотношения

$$p_{кр} = p_2^* \left( \frac{2}{n+1} \right)^{\frac{n}{n-1}},$$

где  $n$  — показатель процесса расширения.

Итерационное уточнение давления выполняется по формуле

$$p_{кр i+1} = \left( p \frac{1+nM^2}{1+n} \right)_{кр i}.$$

Здесь  $M = \left( \frac{W}{a} \right)_{кр i}$ ,  $W_{кр i} = \sqrt{2(h_2^* - h(S_2^*, p_{кр i}))}$ ,  $a_{кр i} = a'_i$ .

Решение считается найденным, когда абсолютное значение разности потока и местной скорости звука менее 0,01 м/с.

**Расчет производных состава и равновесной скорости звука в газовой фазе.** Соотношения для расчета скорости звука в газовой фазе имеют следующий вид:

$$(a')^2 = V^2 \frac{C'_p (\partial p / \partial T)_V}{C'_V (\partial V / \partial T)_p}, \quad (1)$$

где

$$V = \frac{RTn^{(g)}}{p};$$

$$C'_p = \sum_{i \in I_T} \left[ n_i (\partial H_i^0 / \partial T)_p + H_i^0 (\partial n_i / \partial T)_p \right] = C_p + \sum_{i \in I_T} H_i^0 (\partial n_i / \partial T)_p;$$

$$C'_V = \sum_{i \in I_T} \left[ n_i (\partial U_i^0 / \partial T)_V + U_i^0 (\partial n_i / \partial T)_V \right] = C_V + \sum_{i \in I_T} U_i^0 (\partial n_i / \partial T)_V$$

( $I_T$  — множество индексов всех веществ);

$$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \frac{n^{(g)}R}{V} + \frac{RT}{V} \left( \frac{\partial n^{(g)}}{\partial T} \right)_V;$$

$$\left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{n^{(g)}R}{p} + \frac{RT}{p} \left( \frac{\partial n^{(g)}}{\partial T} \right)_p,$$

$n^{(g)} = \sum_{i \in I_g} n_i$  ( $I_g$  — множество индексов газообразных веществ);

$$(a')^2 = pV \frac{C'_p}{C'_V} \frac{n^{(g)} + T\dot{n}_V^{(g)}}{n^{(g)} + T\dot{n}_p^{(g)}}, \quad (2)$$

где

$$\dot{n}_V^{(g)} = \left( \frac{\partial n^{(g)}}{\partial T} \right)_V; \quad \dot{n}_p^{(g)} = \left( \frac{\partial n^{(g)}}{\partial T} \right)_p.$$

Для вещества, равновесная концентрация которого отлична от нуля, справедливо соотношение

$$G_i - \sum_{j=1}^m a_{ji} \lambda_j = 0, \quad i \in I_T, \quad (3)$$

где  $G_i$  — энергия Гиббса вещества  $i$ ;  $a_{ji}$  — число атомов химического элемента  $j$  в веществе  $i$  (формульная матрица);  $\lambda_k$  — неопределенные множители Лагранжа;  $I_T$  — множество индексов всех веществ.

Будем использовать модель идеальный газ–идеальный раствор–нулевой объем конденсированных фаз, в соответствии с которой сжимаемость газовой фазы описывается уравнением состояния идеального газа, все растворы являются идеальными, а объем конденсированных веществ пренебрежимо мал.

Предполагается, что равновесный состав установлен. Будем учитывать в расчетах только активные фазы, т. е. фазы, которые присутствуют в термодинамической системе.

Пусть система состоит из  $C$  отдельных конденсированных фаз и  $M$  фаз — растворов. В частном случае система может состоять из одной фазы. Необходимо найти производные состава по температуре при постоянных значениях давления и объема.

**Условие  $p = \text{const}$ .** 1. *Конденсированные вещества.* Продифференцируем выражение (3) по температуре при постоянном давлении с учетом того, что

$$G_i = G_i^0 = H_i^0 - TS_i^0;$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{G_i^0}{RT} \right)_p = -\frac{H_i^0}{RT^2},$$

тогда получим

$$\sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} = -\frac{H_i^0}{RT^2}, \quad i = 1, \dots, C. \quad (4)$$

2. *Растворы.* Для смеси газов запишем выражения

$$G_i = G_i^0 + RT \ln \frac{pn_i}{n^{(g)}};$$

$$\sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} = -\frac{H_i^0}{RT^2} + \frac{\dot{n}_{ip}}{n_i} - \frac{\dot{n}_p^{(g)}}{n}$$

или

$$\dot{n}_{ip} = \dot{n}_p^{(g)} \frac{n_i}{n^{(g)}} + n_i \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} + \frac{n_i H_i^0}{RT^2}, \quad i \in I_g \quad (5)$$

( $I_g$  — множество индексов компонентов газовой фазы).

Суммируя по всем газообразным веществам, получаем соотношение

$$\sum_{i \in I_g} \sum_{j=1}^m n_i a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} = - \sum_{i \in I_g} \frac{n_i H_i^0}{RT^2}. \quad (6)$$

Для конденсированного раствора приведем выражение

$$G_i = G_i^0 + RT \ln \frac{n_i}{n^{(k)}},$$

$n^{(k)} = \sum_{i \in I_k} n_i$  ( $I_k$  — множество индексов компонентов раствора  $k$ ).

Нетрудно убедиться, что соотношения (5) и (6) будут выполняться и для компонентов конденсированного раствора, следовательно,

$$\dot{n}_{ip} = \dot{n}_p^{(k)} \frac{n_i}{n^{(k)}} + n_i \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} + \frac{n_i H_i^0}{RT^2}, \quad i \in I_k, \quad k=1, 2, \dots, M, \quad (7)$$

$\dot{n}_p^{(k)}$  — производная числа молей фазы  $k$  по температуре при постоянном давлении;

$$\sum_{i \in I_k} \sum_{j=1}^m n_i a_{ji} \dot{\lambda}_{jp} = - \sum_{i \in I_k} \frac{n_i H_i^0}{RT^2}, \quad k=1, 2, \dots, M. \quad (8)$$

### 3. Уравнение баланса массы

$$\sum_{i \in I_T} a_{ji} n_i = b_j, \quad j=1, \dots, m,$$

после дифференцирования примет вид

$$\sum_{i \in I_T} a_{ji} \dot{n}_{ip} = 0, \quad j=1, \dots, m. \quad (9)$$

При формировании расчетной матрицы в соотношение (9) для компонента смеси газов или конденсированного раствора вместо производной состава по температуре при постоянном давлении необходимо подставлять правую часть (7).

Неизвестными в полученной системе линейных уравнений (4), (8) и (9) являются производные чисел молей фаз по температуре при постоянном давлении  $\dot{n}_p^{(k)}$  и  $\dot{\lambda}_{jp}$ . Рассчитав эти величины, значения производных состава компонентов растворов можно найти с использованием соотношений (7).

**Условие  $V = \text{const}$ .** 1. *Конденсированные вещества.* Запишем следующее выражение:

$$\sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jV} = - \frac{H_i^0}{RT^2}, \quad i=1, \dots, C. \quad (10)$$

### 2. Растворы. Смесь газов.

Дифференцируя по температуре соотношение

$$\ln n_i = - \frac{G_i^0}{RT} - \ln \frac{RT}{V} + \sum_{j=1}^m a_{ji} \lambda_j, \quad i \in I_g,$$

получаем

$$\frac{\dot{n}_{iV}}{n_i} = - \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{G_i^0}{RT} \right)_V - \frac{1}{T} + \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jV},$$

где

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{G_i^0}{RT} \right)_V = -\frac{H_i^0}{RT^2};$$

$$\frac{\dot{n}_{iV}}{n_i} = \frac{H_i^0}{RT^2} - \frac{1}{T} + \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jV}.$$

Тогда имеем

$$\dot{n}_{iV} = \frac{n_i H_i^0}{RT^2} - \frac{n_i}{T} + n_i \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jV}, \quad i \in I_g; \quad (11)$$

$$\dot{n}_V^{(g)} = \sum_{i \in I_g} \dot{n}_{iV} = \sum_{i \in I_g} \frac{n_i H_i^0}{RT^2} - \frac{n^{(g)}}{T} + \sum_{i \in I_g} \sum_{j=1}^m n_i a_{ji} \dot{\lambda}_{jV};$$

$$\dot{n}_V^{(g)} - \sum_{i \in I_g} \sum_{j=1}^m n_i a_{ji} \dot{\lambda}_{jV} = \sum_{i \in I_g} \frac{n_i H_i^0}{RT^2} - \frac{n^{(g)}}{T}. \quad (12)$$

Для конденсированного раствора приведем соотношения:

$$G_i = G_i^0 + RT \ln \frac{n_i}{n^{(k)}};$$

$$\dot{n}_{iV} = \dot{n}_V^{(k)} \frac{n_i}{n^{(k)}} + n_i \sum_{j=1}^m a_{ji} \dot{\lambda}_{jV} + \frac{n_i H_i^0}{RT^2}, \quad i \in I_k, \quad k = 2, \dots, M; \quad (13)$$

$$\sum_{i \in I_k} \sum_{j=1}^m n_i a_{ji} \dot{\lambda}_{jV} = - \sum_{i \in I_k} \frac{n_i H_i^0}{RT^2}, \quad k = 2, \dots, M. \quad (14)$$

3. Уравнение баланса массы имеет вид

$$\sum_{i \in I_T} a_{ji} \dot{n}_{iV} = 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (15)$$

При формировании расчетной матрицы в (15) вместо производной состава компонента по температуре при постоянном объеме необходимо подставлять правую часть соотношения (11) для компонента смеси газов или правую часть соотношения (13) для компонента конденсированного раствора.

Неизвестными являются  $\dot{n}_V^{(k)}$  и  $\dot{\lambda}_{jV}$ , значения которых можно найти, решив систему линейных уравнений (10), (12), (14) и (15). Значения производных состава компонентов растворов можно найти с использованием (11) и (13).



**Результаты и обсуждение.** Для тестирования работы описанного алгоритма расчета равновесного состава написана программа ENGINE на языке программирования Julia (версия 1.5), сопряженная с базой данных ИВТАНТЕРМО [15], которая содержит сведения о термодинамических свойствах более 3300 веществ. Для решения рассматриваемой задачи информацию о термодинамических свойствах веществ оказалось целесообразным записать в два текстовых файла, которые удобно анализировать средствами языка Julia. В одном файле хранятся сведения о химических формулах веществ, в другом — комплекты полиномов для вычисления термодинамических функций. Время выполнения одного расчета четырехэлементного топлива (CHON), который включает в себя определение характеристик продуктов сгорания в камере, критическом сечении и на срезе сопла, варьируется в диапазоне 3...5 с (Intel Core i7-9750H, 2.6 GHz, оперативная память 8 Гб). Сравнительно большое время вычислений объясняется тем, что для расчета равновесия используется универсальная процедура оптимизации. Иными словами, «платой» за простоту программы является относительно низкое быстродействие.

Результаты расчетов сравнивались с результатами программы TERPA [16]. Исходные данные к расчету и некоторые численные значения, полученные с использованием двух программ, приведены в табл. 1, 2. Отметим, что результаты практически совпадают. Обозначения:  $p_2^*$  — давление в камере сгорания;  $H$  — энтальпия топлива;  $T_2^*$  — температура продуктов сгорания;  $I_{уд,п}$  — удельный пустотный импульс;  $\beta$  — расходный комплекс.

Таблица 1

Исходные данные к расчетам

| Номер варианта | $p_2^*$ , МПа | $p_a$ , МПа | $H$ , кДж/кг | Окислитель                        | Горючее                                      | $K_m$ |
|----------------|---------------|-------------|--------------|-----------------------------------|--|-------|
| 1              | 15            | 0,02        | -1495,476    | O <sub>2</sub> (ж)                | CH <sub>4</sub> (ж)                          | 3,71  |
| 2              | 10            | 0,1         | -770         | O <sub>2</sub> (ж)                | C <sub>7,2</sub> H <sub>13,6</sub>           | 3,07  |
| 3              | 10            | 0,01        | 56,185       | N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (ж) | C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> | 2,863 |

Таблица 2

Результаты расчета

| Программа        | $T_2^*$ , К | $I_{уд,п}$ , м/с | $\beta$ , м/с |
|------------------|-------------|------------------|---------------|
| <i>Вариант 1</i> |             |                  |               |
| TERPA            | 3676,33     | 3728,77          | 1828,98       |
| ENGINE           | 3676,33     | 3728,78          | 1828,98       |

| Программа        | $T_2$ , К | $I_{уд.п.}$ , м/с | $\beta$ , м/с |
|------------------|-----------|-------------------|---------------|
| <i>Вариант 2</i> |           |                   |               |
| ТЕРРА            | 3758,86   | 3248,21           | 1752,29       |
| ENGINE           | 3758,81   | 3248,09           | 1752,27       |
| <i>Вариант 3</i> |           |                   |               |
| ТЕРРА            | 3473,23   | 3428,55           | 1709,86       |
| ENGINE           | 3473,23   | 3428,56           | 1709,86       |

**Заключение.** Приведены алгоритм и программа термодинамического расчета характеристик химико-термического ракетного двигателя. Результаты вычислений хорошо согласуются со значениями, полученными с использованием программы ТЕРРА. Программа написана на языке Julia, ее текст может быть легко адаптирован для использования более сложных моделей рабочего процесса в ракетном двигателе, программу можно использовать также и в учебном процессе.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Зельдович Я.Б., Полярный А.И. Расчеты тепловых процессов при высокой температуре. М., НИИ № 1, 1947.
- [2] Huff V.N., Morrell V.E. General method for computation of equilibrium composition and temperature of chemical reactions. *NACA Technical report 2113*. Washington, NACA, 1950.
- [3] Huff V.N., Gordon S., Morrell V.E. General method and thermodynamic tables for computation of equilibrium composition and temperature of chemical reactions. *NACA Technical report 1037*. Washington, NACA, 1951.
- [4] Donegan A.J., Farber M. Solution of thermochemical propellant calculations on a high-speed digital computer. *J. Jet Propuls.*, 1956, vol. 26, no. 3, pp. 164–171.  
DOI: <https://doi.org/10.2514/8.6950>
- [5] Villars D.S. A method of successive approximations for computing combustion equilibria on a high speed digital computer. *J. Phys. Chem.*, 1959, vol. 63, no. 4, pp. 521–525.  
DOI: <https://doi.org/10.1021/j150574a016>
- [6] Gordon S., Zeleznik F.J. A General IBM 704 or 7090 computer program for computation of chemical equilibrium compositions, rocket performance, and Chapman — Jouguet detonations. *NACA Technical report D-1454*. Washington, NACA, 1962.
- [7] Глушко В.П., ред. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. 1. М., АН СССР, ВИНТИ, 1971.
- [8] Синярёв Г.Б. Универсальный метод решения системы уравнений для определения равновесного состава рабочего тела. В: Некоторые вопросы механики. М., Оборонгиз, 1962, с. 80–106.

- [9] Синярёв Г.Б., Слынько Л.Е., Трусков Б.Г. Метод, универсальный алгоритм и программа термодинамического расчета многокомпонентных гетерогенных систем. М., Изд-во МВТУ им. Н.Э. Баумана, 1978.
- [10] Синярёв Г.Б., Ватолин Н.А., Трусков Б.Г. и др. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М., Наука, 1982.
- [11] Gordon S., McBride B.J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. P. 1. Analysis. *NACA Technical report archive 19950013764*. Washington, NACA, 1994.
- [12] Wächter A., Biegler L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program.*, 2006, vol. 106, no. 1, pp. 25–57. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10107-004-0559-y>
- [13] Dunning I., Huchette J., Lubin M. JuMP: a modeling language for mathematical optimization. *SIAM Rev.*, 2017, vol. 59, no. 2, pp. 295–320. DOI: <https://doi.org/10.1137/15M1020575>
- [14] Белов Г.В. Расчет равновесного состава сложных термодинамических систем с использованием языка Julia и библиотеки Ipopt. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение*, 2021, № 3 (136), с. 24–45. DOI: <https://doi.org/10.18698/0236-3933-2021-3-24-45>
- [15] Belov G.V., Dyachkov S.A., Levashov P.R., et al. The IVTANTHERMO — online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2018, vol. 946, art. 012120. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/946/1/012120>
- [16] Белов Г.В., Трусков Б.Г. Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013.

**Белов Глеб Витальевич** — д-р техн. наук, старший научный сотрудник лаборатории теплофизических баз данных ОИВТ РАН (Российская Федерация, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2); ведущий научный сотрудник лаборатории химической термодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова (Российская Федерация, 119991, Ленинские горы, д. 1, стр. 3).

**Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Белов Г.В. Развитие средств термодинамического расчета характеристик ракетного двигателя с использованием языка программирования Julia. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение*, 2021, № 4 (139), с. 80–93. DOI: <https://doi.org/10.18698/0236-3941-2021-4-80-93>

## DEVELOPMENT OF TOOLS FOR THERMODYNAMIC CALCULATION OF ROCKET ENGINE CHARACTERISTICS USING THE Julia PROGRAMMING LANGUAGE

G.V. Belov

gbelov@yandex.ru

Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences,  
Moscow, Russian Federation  
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

---

### Abstract

The experience in developing an algorithm and a program for the thermal-chemical calculation of the characteristics of a rocket engine is presented. The program is written in Julia. To calculate the equilibrium composition of combustion products the freely distributed library Ipopt is used. The program is interfaced to the database on thermodynamic properties of individual substances IVTANTERMO. For the convenience of processing, the information on thermodynamic properties is stored in two text files of a special form. The program has been developed using the simplest working process model according to which the flow is one-dimensional, the product flow is adiabatic, there are no friction losses, the product flow is equilibrium, and the speed of condensed particles is equal to the gas flow speed. Ratios for calculating the derivatives of composition, as well as equilibrium values of heat capacity and sound velocity are given. The text of the program can be used in the study process and can easily be adapted to more complex models of the rocket engine workflow. The calculation results obtained using the developed program are in good agreement with the results of TERRA calculations. The execution time of one calculation for a four-element fuel, which includes the determination of the combustion products characteristics in the chamber, the critical cross section and at the nozzle cross section, varies in the range of 3–5 s

### Keywords

*Combustion products, rocket fuel, thermodynamic modeling*

Received 09.02.2021

Accepted 06.03.2021

© Author(s), 2021

---

### REFERENCES

- [1] Ze'dovich Ya.B., Polyarnyy A.I. Raschety teplovykh protsessov pri vysokoy temperature [Calculation of thermal processes at high temperature]. Moscow, NII no. 1 Publ., 1947.

- [2] Huff V.N., Morrell V.E. General method for computation of equilibrium composition and temperature of chemical reactions. *NACA Technical report 2113*. Washington, NACA, 1950.
- [3] Huff V.N., Gordon S., Morrell V.E. General method and thermodynamic tables for computation of equilibrium composition and temperature of chemical reactions. *NACA Technical report 1037*. Washington, NACA, 1951.
- [4] Donegan A.J., Farber M. Solution of thermochemical propellant calculations on a high-speed digital computer. *J. Jet Propuls.*, 1956, vol. 26, no. 3, pp. 164–171.  
DOI: <https://doi.org/10.2514/8.6950>
- [5] Villars D.S. A method of successive approximations for computing combustion equilibria on a high speed digital computer. *J. Phys. Chem.*, 1959, vol. 63, no. 4, pp. 521–525. DOI: <https://doi.org/10.1021/j150574a016>
- [6] Gordon S., Zeleznik F.J. A General IBM 704 or 7090 computer program for computation of chemical equilibrium compositions, rocket performance, and Chapman — Jouguet detonations. *NACA Technical report D-1454*. Washington, NACA, 1962.
- [7] Glushko V.P., ed. Термодинамические и тепловысеские свойства продуктов сгорания. Т. 1 [Thermodynamic and thermophysical properties of combustion products. Vol. 1]. Moscow, AN SSSR Publ., VINITI Publ., 1971.
- [8] Sinyarev G.B. Universal’nyy metod resheniya sistemy uravneniy dlya opredeleniya ravnovesnogo sostava rabocheho tela [Universal method of solving equation system for determination of equilibrium composition of a working body]. V: Nekotorye voprosy mekhaniki [In: Some issues of mechanics]. Moscow, Oborongiz Publ., 1962, pp. 80–106 (in Russ.).
- [9] Sinyarev G.B., Slyn’ko L.E., Trusov B.G. Metod, universal’nyy algoritm i programma termodinamicheskogo rascheta mnogokomponentnykh geterogennykh sistem [Method, universal algorithm and program for thermodynamic computation of multicomponent heterogeneous systems]. Moscow, Bauman MHTU Publ., 1978.
- [10] Sinyarev G.B., Vatolin N.A., Trusov B.G., et al. Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov [Using computer for thermodynamic calculations of metallurgic processes]. Moscow, Nauka Publ., 1982.
- [11] Gordon S., McBride B.J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. P. 1. Analysis. *NACA Technical report archive 19950013764*. Washington, NACA, 1994.
- [12] Wächter A., Biegler L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program.*, 2006, vol. 106, no. 1, pp. 25–57. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10107-004-0559-y>
- [13] Dunning I., Huchette J., Lubin M. JuMP: a modeling language for mathematical optimization. *SIAM Rev.*, 2017, vol. 59, no. 2, pp. 295–320.  
DOI: <https://doi.org/10.1137/15M1020575>

[14] Belov G.V. Calculation of equilibrium composition of complex thermodynamic systems using Julia language and Ipopt library. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Instrument Engineering*, 2021, no. 3 (136), pp. 24–45 (in Russ.).

DOI: <https://doi.org/10.18698/0236-3933-2021-3-24-45>

[15] Belov G.V., Dyachkov S.A., Levashov P.R., et al. The IVTANTHERMO — online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2018, vol. 946, art. 012120.

DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/946/1/012120>

[16] Belov G.V., Trusov B.G. Термодинамическое моделирование химически реагирующей системы [Thermodynamic modelling of reacting chemical systems]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2013.

**Belov G.V.** — Dr. Sc. (Eng.), Senior Researcher, Laboratory of Thermophysical Databases, Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences (Izhorskaya ul. 13, str. 2, Moscow, 125412 Russian Federation); Leading Researcher, Laboratory of Chemical Thermodynamics, Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University (Leninskie Gory 1, str. 3, Moscow, 119991 Russian Federation).

**Please cite this article in English as:**

Belov G.V. Development of tools for thermodynamic calculation of rocket engine characteristics using the Julia programming language. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Mechanical Engineering*, 2021, no. 4 (139), pp. 80–93 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.18698/0236-3941-2021-4-80-93>