



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΡΕΥΣΤΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ

ΠΡΟΗΓΜΕΝΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΥΣΗΣ ΣΕ ΑΕΡΙΟΣΤΡΟΒΙΛΟΥΣ

Διπλωματική Εργασία
ΣΠΥΡΙΔΩΝ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΣ

Επίβλεψη: **Κ. ΜΑΘΙΟΥΔΑΚΗΣ**
Α. ΤΣΑΛΑΒΟΥΤΑΣ

Αθήνα, February 10

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Για την επιτυχημένη εκπόνηση μιας διπλωματικής, αλλά και γενικά κάθε εργασίας, απαραίτητη προϋπόθεση είναι η ανταλλαγή γνώσεων. Προσφέρεις αλλά και κυρίως μαθαίνεις από τους άλλους. Κατόπιν τούτου θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Αναστάσιο Δ. Τσαλαβούτα για τη συνεχή καθοδήγηση του κατά τη διάρκεια επεξεργασίας και συγγραφής της παρούσας εργασίας.

Επίσης εκφράζω τις θερμές μου ευχαριστίες στον επιβλέποντα Καθηγητή Κ. Μαθιουδάκη και στον επιστημονικό συνεργάτη του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών Α.Αλεξίου για τις χρήσιμες υποδείξεις και επισημάνσεις τους.

Τέλος ένα ιδιαίτερο ευχαριστώ θέλω ν' απευθύνω στους μη ακαδημαϊκούς Πάνο, Αλέξανδρο, Ευγενία και στην οικογένειά μου για την αμέριστη ψυχολογική υποστήριξή τους.

Σπυρίδων Καποδίστριας

Φεβρουάριος 2010

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ	iii
ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ	vii
1. Εισαγωγή	1
1.1 Γενικά για την καύση στους αεριοστρόβιλους	2
1.2 Μοντελοποίηση της καύσης	3
1.3 Στόχοι και δομή παρούσας διπλωματικής εργασίας	5
2. Επισκόπηση Μεθόδων Μοντελοποίησης Καύσης και Διαθέσιμα Λογισμικά	7
2.1 Επισκόπηση μεθόδων μοντελοποίησης της καύσης	7
2.1.1 Θερμικός ισολογισμός – Πλήρης καύση	7
2.1.2 Περιγραφή χημικής ισορροπίας- διάστασης	9
2.1.3 Χημική κινητική	17
2.2 Λογισμικό μοντελοποίησης καύσης και προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων	17
2.2.1 Λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης	18
2.2.2 Λογισμικά προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων	22
2.3 Σύνοψη – Συμπεράσματα	25
3. Περιγραφή NASA CEA	27
3.1 Χαρακτηριστικά και δυνατότητες NASA CEA	27
3.2 Δομή του NASA CEA	29
3.3 Χρήση NASA CEA	31
3.3.1 Για μείγμα αντιδρώντων που όλα τα αντιδρώντα βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA	31
3.3.2 Για μείγμα αντιδρώντων που έστω και ένα από τα αντιδρώντα δεν βρίσκεται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA.....	47
3.4 Επίδραση χημικής διάστασης στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου	54
3.5 Επίδραση λογισμικού χημικής ισορροπίας στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου	58
3.6 Σύνοψη – Συμπεράσματα	59
4. Επέκταση Δυνατοτήτων του Λογισμικού PROOSIS & Εφαρμογές σε Επίπεδο Μηχανής 61	
4.1 Τρόποι μοντελοποίησης εργαζόμενου μέσου	61
4.2 Περιγραφή PROOSIS.....	63
4.3 Δημιουργία μοντέλου εργαζόμενου μέσου για το PROOSIS μέσω του NASA CEA	67

4.4 Επίδραση ακρίβειας μοντέλου εργαζόμενου μέσου σε επίπεδο μηχανής	76
4.4.1 Μελέτη 1 ^η : CFM56.....	78
4.4.2 Μελέτη 2 ^η : GTAC	89
4.5 Σύνοψη – Συμπεράσματα	116
5. Εναλλακτικά Καύσιμα στους Αεριοστροβίλους	119
5.1 Προοπτικές χρήσης εναλλακτικών καυσίμων στους αεριοστροβίλους	119
5.2 Βιοκαύσιμα και εφαρμογές με μοντέλα εργαζόμενου μέσου από βιοκαύσιμα	125
5.2.1 Μελέτη καύσης και ρύπανσης των δύο ειδών βιοντήζελ.....	126
5.2.2 Μελέτη επίδρασης των δύο ειδών βιοντήζελ στην επανασχεδίαση μηχανής	129
5.3 Σύνοψη – Συμπεράσματα	134
6. Σύνοψη – Συμπεράσματα.....	137
7. Βιβλιογραφία	143
Π1. Χημικά στοιχεία, ενώσεις και ιόντα στη βιβλιοθήκη thermo.lib του NASA CEA.....	I
Π2. Υπορουτίνες του NASA CEA.....	IX
Π2.1 Τομέας κυρίως προγράμματος και μπλοκ δεδομένων	X
Π2.1.1 Κυρίως πρόγραμμα.....	X
Π2.1.2 Μπλοκ δεδομένων.....	XI
Π2.2 Τομέας προεπεξεργασίας δεδομένων.....	XII
Π2.3 Τομέας γενικής επεξεργασίας αρχείου εισόδου	XII
Π2.4 Τομέας εφαρμογών	XIV
Π2.5 Τομέας συμπληρωματικής επεξεργασίας των δεδομένων εισόδου.....	XV
Π2.6 Τομέας Ισορροπίας	XVI
Π2.7 Τομέας ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας.....	XVII
Π2.8 Τομέας αποτελεσμάτων	XVII
Π3. Υπολογιστικοί κώδικες σε Fortran	XIX

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ**ΞΕΝΟΓΛΩΣΣΑ ΣΥΜΒΟΛΑ**

Ar	Αργόν
CO	Μονοξείδιο του άνθρακα
CO ₂	Διοξείδιο του άνθρακα
C _p	Ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση
FAR	Λόγος καυσίμου-αέρα (Fuel to Air Ratio)
GIACC	Group on International Aviation and Climate Change
H, h	Ενθαλπία
ICAO	International Civil Aviation Organization
LHV	Κατώτερη θερμογόνος δύναμη καυσίμου (Lower Heating Value)
H ₂	Υδρογόνο
H ₂ O	Υδρατμοί
N ₂	Αζώτο
NO	Μονοξείδιο του αζώτου
NO ₂	Διοξείδιο του αζώτου
NO _x	Οξειδία του αζώτου
N ₂ O	Υπεροξείδιο του αζώτου
OH	Υδροξύλιο
O ₂	Οξυγόνο
P	Πίεση
P _t	Ολική πίεση
R _u	Παγκόσμια σταθερά των αερίων = 8.3143 J/(mol × K)
S, s	Εντροπία
SFC	Ειδική κατανάλωση καυσίμου (Specific Fuel Consumption)

SO ₂	Διοξείδιο του θείου
T	Θερμοκρασία
T _t	Ολική θερμοκρασία
UHC	Άκαυστοι υδρογονάνθρακες (Unburnt Hydro Carbons)
VIVACE-ECP	Value Improvement through a Virtual Aeronautical Collaborative Enterprise – European Cycle Program
WAR	Λόγος νερού-αέρα στο οξειδωτικό (Water to Air Ratio)

ΕΛΛΗΝΙΚΑ ΣΥΜΒΟΛΑ

γ	Ισεντροπικός εκθέτης
η _b	Βαθμός απόδοσης θαλάμου καύσης

ΕΚΘΕΤΕΣ

—	Γραμμομοριακό μέγεθος
---	-----------------------

ΔΕΙΚΤΕΣ

calc	Υπολογισμένο
d	λαμβάνεται υπόψη η Διάσταση (dissociation)
i	Συνιστώσα του μείγματος
m	Αριθμός moles άνθρακα (στο καύσιμο)
mix	Μείγμα
n	Αριθμός moles υδρογόνου (στο καύσιμο)
nd	Αγνοείται η επίδραση της Διάστασης (no dissociation)
p	Αριθμός moles οξυγόνου (στο καύσιμο)
prod	Προϊόντα καύσης
q	Αριθμός moles θείου (στο καύσιμο)

r	Αριθμός moles αζώτου (στο καύσιμο)
react	Αντιδρώντα καύσης
ref	Τιμή αναφοράς π.χ. πίεση, θερμοκρασία
stoich	Στοιχειομετρικό
4	Έξοδος του θαλάμου καύσης

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 2.1: Γραμμομοριακές αναλογίες CO, CO₂ και O₂ για τις πιέσεις και τις θερμοκρασίες του παραδείγματος.....σελ.14

Σχήμα 2.2: Γραφική παράσταση γραμμομοριακής αναλογίας CO συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης της καύσης.....σελ.15

Σχήμα 2.3: Αδιαβατική καύση υδρογόνου με αέρα στο λογισμικό Gaseq.....σελ.18

Σχήμα 2.4: Καθορισμός δεδομένων εισόδου για την καύση του μεθανίου (HPFLAME).....σελ.19

Σχήμα 2.5: Αποτελέσματα για την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης, τη σύσταση και τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου (HPFLAME).....σελ.20

Σχήμα 2.6: Το γραφικό περιβάλλον του CHEMKINσελ.21

Σχήμα 2.7: Εισαγωγή δεδομένων για το σημείο σχεδίασης ενός στροβιλοαντιδραστήρα απλού ρεύματος στο GasTurb.....σελ.23

Σχήμα 2.8: Συγκρότηση μοντέλου Στροβιλοαντιδραστήρα Διπλού τυμπάνου με το πρόγραμμα GSP.....σελ.24

Σχήμα 3.1: Στοιχεία για το Jet-A(L) από τη βιβλιοθήκη θερμοδυναμικών ιδιοτήτων thermo.lib του NASA CEA.....σελ.30

Σχήμα 3.2: Σύσταση αέρα κατά moles και κατά μάζα στο NASA CEA.....σελ.32

Σχήμα 3.3: Καρτέλα Problem στο NASA CEA για τον καθορισμό του τύπου του προβλήματος και του λόγου καυσίμου-αέρα και υποκαρτέλα για τον καθορισμό της πίεσης και της ενθαλπίας (προαιρετικά) των προϊόντων της καύσης.....σελ.35

Σχήμα 3.4: Καρτέλα Reactant και υποκαρτέλα στο NASA CEA για τον καθορισμό των χαρακτηριστικών του μείγματος των αντιδρώντων (οξειδωτικού και καυσίμου).....σελ.37

Σχήμα 3.5: Καρτέλα Only στο NASA CEA για σύγκλιση με μόνο ορισμένα προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία.....σελ.39

Σχήμα 3.6: Καρτέλα Omit στο NASA CEA για παράλειψη κάποιων προϊόντων κατά τη σύγκλιση του κώδικα κατά τη χημική ισορροπία	σελ.40
Σχήμα 3.7: Καρτέλα Insert στο NASA CEA για να την εξαρχής λήψη συμπυκνωμάτων στους υπολογισμούς χημικής ισορροπίας ως πιθανά προϊόντα.....	σελ.41
Σχήμα 3.8: Καρτέλα Output στο NASA CEA για τον καθορισμό διαφόρων παραμέτρων του αρχείου αποτελεσμάτων (.out).....	σελ.43
Σχήμα 3.9: Αρχείο εισόδου στο NASA CEA [kaush_JetA.inp].....	σελ.44
Σχήμα 3.10: Αρχείο αποτελεσμάτων στο CEA [kaush_JetA.out].....	σελ.44
Σχήμα 3.11: Αρχείο αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση στο NASA CEA [kaush_JetA.plt].....	σελ.45
Σχήμα 3.12: Γραφική παράσταση αδιαβατικής θερμοκρασίας καύσης T – λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για P=10bar.....	σελ.46
Σχήμα 3.13: Γραφική παράσταση κατά mole σύστασης καυσαερίου - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για P=10bar (μεγάλες συγκεντρώσεις).....	σελ.46
Σχήμα 3.14: Γραφική παράσταση κατά mole σύστασης καυσαερίου - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για P=10bar (μικρές συγκεντρώσεις).....	σελ.47
Σχήμα 3.15: Καθορισμός δεδομένων στο αρχείο εισόδου του NASA CEA για ένα αντιδρών το οποίο δε βρίσκεται στη θερμοδυναμική του βιβλιοθήκη.....	σελ.48
Σχήμα 3.16: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ’ απόλυτη τιμή, της θερμοκρασίας που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.....	σελ.52
Σχήμα 3.17: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ’ απόλυτη τιμή, της ειδικής θερμοχωρητικότητας υπό σταθερή πίεση που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.....	σελ.53
Σχήμα 3.18: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ’ απόλυτη τιμή, του ισεντροπικού εκθέτη που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.....	σελ.53

Σχήμα 3.19: Επίδραση του λόγου καυσίμου-αέρα (FAR) και της χημικής διάστασης στην ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.....σελ.54	σελ.54
Σχήμα 3.20: Επίδραση του λόγου καυσίμου-αέρα (FAR) και της χημικής διάστασης στον ισεντροπικό εκθέτη γ για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.....σελ.55	σελ.55
Σχήμα 3.21: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην ποσοστιαία απόκλιση του γ εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.....σελ.55	σελ.55
Σχήμα 3.22: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην ποσοστιαία απόκλιση του C_p εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.....σελ.56	σελ.56
Σχήμα 3.23: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην σταθερά των αερίων R για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA...σελ.56	σελ.56
Σχήμα 3.24: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην απόλυτη απόκλιση της αδιαβατικής θερμοκρασίας καύσης T εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.....σελ.57	σελ.57
Σχήμα 3.25: Ποσοστιαία απόκλιση του C_p του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση με πλήρη διάσταση του Μεθανίου για $\Phi=0.9$ και $P=20\text{atm}$ με τα λογισμικά TPEQUIL και Gaseq από το CEA.....σελ.58	σελ.58
Σχήμα 3.26: Ποσοστιαία απόκλιση του ισεντροπικού εκθέτη του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση με πλήρη διάσταση του Μεθανίου για $\Phi=0.9$ και $P=20\text{atm}$ με τα λογισμικά TPEQUIL και Gaseq από το CEA.....σελ.59	σελ.59
Σχήμα 4.1: Μοντέλο μηχανής διπλού τυμπάνου απλού ρεύματος στο PROOSIS.....σελ.63	σελ.63
Σχήμα 4.2: Μοντέλο του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS.....σελ.66	σελ.66
Σχήμα 4.3: Πίνακας του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS για τον υπολογισμό της ειδικής ενθαλπίας του αέρα και του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) υποθέτοντας πλήρους χημική διάσταση στις 50atm.....σελ.66	σελ.66

Σχήμα 4.4: Σύσταση κατά mole και κατά μάζα του τυπικού φυσικού αερίου [20].....σελ.70	σελ.70
Σχήμα 4.5: Αρχείο εισόδου για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με τον υγρό αέρα για το no dissociation μοντέλο για θερμοκρασίες 200-1600K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06.....σελ.72	σελ.72
Σχήμα 4.6: Αρχείο εισόδου για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το ξηρό αέρα για το dissociation μοντέλο για θερμοκρασίες 200-1600K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06.....σελ.72	σελ.72
Σχήμα 4.7: Αρχείο αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση [dry_diss_2.plt]...σελ.72	σελ.72
Σχήμα 4.8: Αρχείο αποτελεσμάτων plt με τις ενθαλπίες σχηματισμού του εργαζόμενου μέσου στους 298.15K για κάθε FAR.....σελ.74	σελ.74
Σχήμα 4.9: Διαδικασία δημιουργίας μοντέλων εργαζόμενου μέσου.....σελ.75	σελ.75
Σχήμα 4.10: Γραφικό περιβάλλον CFM56-7b27 deck for Fuel Study.....σελ.78	σελ.78
Σχήμα 4.11: Μοντέλο κινητήρα CFM56 στο PROOSIS.....σελ.78	σελ.78
Σχήμα 4.12: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας...σελ.79	σελ.79
Σχήμα 4.13: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.80	σελ.80
Σχήμα 4.14: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.80	σελ.80
Σχήμα 4.15: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην ειδική κατανάλωση καυσίμου της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.82	σελ.82
Σχήμα 4.16: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην θερμοκρασία εξόδου των καυσαερίων από το θάλαμο καύσης της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.82	σελ.82

Σχήμα 4.17: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην πίεση εξόδου του αέρα από το συμπιεστή υψηλής πίεσεως της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.83	σελ.83
Σχήμα 4.18: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην κατανάλωση καυσίμου της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.....σελ.83	σελ.83
Σχήμα 4.19: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στα παραγόμενα οξείδια του αζώτου από την μηχανή CFM56 κατά την απογείωση.....σελ.85	σελ.85
Σχήμα 4.20: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στο παραγόμενο μονοξείδιο του άνθρακα από την μηχανή CFM56 κατά την απογείωση.....σελ.85	σελ.85
Σχήμα 4.21: Γραμμομοριακή αναλογία NO στον ατμοσφαιρικό ξηρό και υγρό αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας στα 29.5bar.....σελ.88	σελ.88
Σχήμα 4.22: Γραμμομοριακή αναλογία NO ₂ , N ₂ O και CO στον ατμοσφαιρικό ξηρό και υγρό αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας στα 29.5bar.....σελ.88	σελ.88
Σχήμα 4.23: Μοντέλο κινητήρα GTAC στο PROOSIS.....σελ.89	σελ.89
Σχήμα 4.24: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 dissociation.....σελ.94	σελ.94
Σχήμα 4.25: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen dissociation.....σελ.95	σελ.95
Σχήμα 4.26: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 dissociation αντίστοιχα.....σελ.96	σελ.96
Σχήμα 4.27: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen dissociation αντίστοιχα.....σελ.96	σελ.96

- Σχήμα 4.28α:** Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.98
- Σχήμα 4.28β:** Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.99
- Σχήμα 4.29α:** Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.99
- Σχήμα 4.29β:** Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.100
- Σχήμα 4.30α:** Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.100
- Σχήμα 4.30β:** Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.101
- Σχήμα 4.31α:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.102
- Σχήμα 4.31β:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο και Μεθάνιο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.102
- Σχήμα 4.31γ:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για το μοντέλο Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.103
- Σχήμα 4.32α:** Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το

μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.103

Σχήμα 4.32β: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο και Μεθάνιο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.104

Σχήμα 4.32γ: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για το μοντέλο Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.104

Σχήμα 4.33α: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο απογείωσης.....σελ.107

Σχήμα 4.33β: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο πλεύσης.....σελ.107

Σχήμα 4.34α: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επίδοσης της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο απογείωσης.....σελ.108

Σχήμα 4.34β: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επίδοσης της μηχανής με τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο πλεύσης.....σελ.108

Σχήμα 4.35: Σχηματική απεικόνιση της μελέτης που έγινε με τα δύο deck του κινητήρα GTAC.....σελ.109

Σχήμα 4.36α: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.110

Σχήμα 4.36β: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.111

- Σχήμα 4.37α:** Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.111
- Σχήμα 4.37β:** Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.112
- Σχήμα 4.38α:** Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.112
- Σχήμα 4.38β:** Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.113
- Σχήμα 4.39α:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.113
- Σχήμα 4.39β:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.114
- Σχήμα 4.40α:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων του θερμού ακροφύσιου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.114
- Σχήμα 4.40β:** Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων του θερμού ακροφύσιου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.115
- Σχήμα 5.1:** Εκπομπές αερίων του θερμοκηπίου για τα συνθετικά καύσιμα συγκριτικά με τα συμβατικά.....σελ.121
- Σχήμα 5.2:** Απαιτήσεις σε εκτάσεις γης για διάφορα βιοκαύσιμα ώστε να καλύψουν τη χρήση των συμβατικών καυσίμων το 2050.....σελ.122
- Σχήμα 5.3:** Χρονοδιάγραμμα εφαρμογής εναλλακτικών καυσίμων.....σελ.122

- Σχήμα 5.4:** Μεσοπρόθεσμες λύσεις για τα καύσιμα μπορεί να περιλαμβάνουν μείγματα εναλλακτικών καυσίμων μαζί με προηγμένη σχεδίαση της μηχανής..σελ.123
- Σχήμα 5.5:** Σχεδίαση του αεροπλάνου Boeing 737 για να χρησιμοποιηθεί σαν καύσιμο το υγρό υδρογόνο.....σελ.124
- Σχήμα 5.6:** Μεταβολή της θερμοκρασίας αδιαβατικής καύσης T συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=20\text{atm}$σελ.127
- Σχήμα 5.7:** Μεταβολή των παραγόμενων NO_x συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=20\text{atm}$σελ.127
- Σχήμα 5.8α:** Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=1\text{atm}$σελ.128
- Σχήμα 5.8β:** Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=20\text{atm}$σελ.128
- Σχήμα 5.8γ:** Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=50\text{atm}$σελ.128
- Σχήμα 5.9:** Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) dissociation για τα μοντέλα Diesel(g), BioDiesel1 & BioDiesel2 dissociation.....σελ.130
- Σχήμα 5.10:** Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.131
- Σχήμα 5.11:** Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.131

Σχήμα 5.12: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.132

Σχήμα 5.13: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επίδοσεων της μηχανής με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.132

Σχήμα 5.14: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.....σελ.133

Σχήμα Π2.1: Τομείς και υπορουτίνες του NASA CEA.....σελ.X

1. Εισαγωγή

Η προστασία του περιβάλλοντος (φαινόμενο του θερμοκηπίου) και η εξοικονόμηση ενέργειας είναι ίσως τα από τα κυρίαρχα ζητήματα που απασχολούν τον κόσμο μας τη σημερινή εποχή. Και τα δύο αυτά θέματα είναι άμεσα συνυφασμένα με τις πηγές ενέργειας και συγκεκριμένα με τον τρόπο με τον οποίο αυτές χρησιμοποιούνται κάτι που σε μεγάλο βαθμό αφορά την οξείδωση του καυσίμου ή πιο κοινά την καύση. Η αρχέγονος αυτή μέθοδος για την παραγωγή ενέργειας εξακολουθεί ακόμα και σήμερα να είναι ο κινητήριος μοχλός για την ανάπτυξη και την τεχνολογία ενώ όπως δείχνουν οι εξελίξεις θα συνεχίσει για αρκετές ακόμη δεκαετίες να βρίσκεται στο προσκήνιο.

Διάφορες μελέτες [1] έχουν δείξει την εξής κατανομή όσον αναφορά τις παγκόσμιες ενεργειακές καταναλώσεις:

- 40% στα κτίρια
- 32% στις μεταφορές
- 28% στις βιομηχανίες

Σήμερα οι αεριοστροβίλοι είναι οι μηχανές που χρησιμοποιούνται ευρέως τόσο στις μεταφορές (με μεγάλη έμφαση βεβαίως στις εναέριες) όσο και στην παραγωγή ενέργειας (ηλεκτρικής ή και συμπαραγωγής). Από τα παραπάνω επομένως είναι προφανής η σημαντική συμμετοχή των αεριοστροβίλων στο ενεργειακό ισοζύγιο και κατ' επέκταση στη ρύπανση του περιβάλλοντος.

Στις εναέριες μάλιστα μεταφορές (αεροπορικοί κινητήρες) οφείλεται [2]:

- το 2.2% του ανθρωπογενούς CO₂
- ένα εξίσου σημαντικό ποσοστό οξειδίων του αζώτου
- τα συμπυκνωμένα καυσαέρια (contrails) που εξέρχονται από τα αεροσκάφη
- οι παραμορφώσεις των σύννεφων

Όλα αυτά έχουν σημαντική επίδραση στο περιβάλλον και γι' αυτό ο σύνδεσμος της Ευρωπαϊκής βιομηχανίας και έρευνας στις εναέριες μεταφορές (ACARE) έχει θεσπίσει κάποιους φιλόδοξους στόχους για το 2020 [2]:

- 50% μείωση των εκπομπών διοξειδίου του άνθρακα
- 80% μείωση των διοξειδίων του αζώτου

σε σχέση με το 2000 που θεωρείται το έτος αναφοράς. Ανάλογοι βέβαια στόχοι έχουν τεθεί για τους επίγειους αεριοστρόβιλους που χρησιμοποιούνται στην παραγωγή ενέργειας σε μεγάλους θερμοηλεκτρικούς σταθμούς.

Η απάντηση στις παραπάνω προκλήσεις για τους αεριοστρόβιλους είναι διττή. Από τη μία κρίνεται ολοένα και πιο απαραίτητη η εξοικονόμηση ενέργειας (καυσίμου) στις θερμικές αυτές μηχανές. Από την άλλη η χρήση εναλλακτικών μορφών ενέργειας βρίσκεται στο προσκήνιο, με τα βιοκαύσιμα και το υδρογόνο να θεωρούνται ήδη τα καύσιμα του μέλλοντος για τους αεριοστρόβιλους. Το βασικότερο επομένως «κλειδί» για την εφαρμογή των παραπάνω κατευθύνσεων και τη στροφή προς τη λεγόμενη «πράσινη» ανάπτυξη είναι η βαθύτερη κατανόηση των διεργασιών της καύσης σε συνδυασμό με την εφαρμογή εναλλακτικών καυσίμων.

1.1 Γενικά για την καύση στους αεριοστρόβιλους

Στο θάλαμο καύσης ενός αεριοστρόβιλου γίνεται η ανύψωση της θερμοκρασίας του αέρα που εξέρχεται από το συμπιεστή. Η ανύψωση αυτή γίνεται με πρόσδοση θερμότητας που προκύπτει από την καύση ενός καυσίμου που αναμιγνύεται με το συμπιεσμένο αέρα, αφού πρώτα βέβαια το καύσιμο ατμοποιηθεί και εισέλθει στη ροή του αέρα [3].

Η γνώση των φαινομένων, χημικών και φυσικών, που διέπουν την καύση είναι βασικής σημασίας για τους αεριοστρόβιλους προκειμένου μετέπειτα είτε να προβούμε σε τεχνικές που μειώνουν την κατανάλωση του καυσίμου είτε να μελετήσουμε την επίδραση που έχουν διάφορα καύσιμα στη σύσταση του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση τους.

Η αλληπάλληλη πειραματική μελέτη θα μπορούσε και έχει δώσει ενδιαφέροντα στοιχεία σχετικά με τις διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στο θάλαμο καύσης. Ωστόσο κάτι τέτοιο είναι ιδιαίτερα δαπανηρό ενώ σε πολλές περιπτώσεις απαγορευτικό προς το μέσο χρήστη που δεν έχει τις απαραίτητες εργαστηριακές εγκαταστάσεις και το χρόνο προκειμένου να διεξάγει τα πειράματα. Από την άλλη έχουμε τη τρομακτική εξέλιξη των υπολογιστών τόσο σε μνήμη όσο και σε ταχύτητα επεξεργασίας με

παράλληλα ολοένα και μειούμενο κόστος. Για τους παραπάνω λόγους η υπολογιστική μοντελοποίηση της καύσης (ή ακόμα και ολόκληρης της λειτουργίας της μηχανής) στους αεριοστρόβιλους (αλλά και στις υπόλοιπες θερμικές μηχανές) κερδίζει συνεχώς έδαφος έναντι του πειράματος και αποτελεί θα λέγαμε τη σημερινή τάση.

1.2 Μοντελοποίηση της καύσης

Για τα διάφορα μοντέλα προσομοίωσης της καύσης, από τα πιο απλά ως τα πιο σύνθετα, θα αναφερθούμε εκτενώς στο επόμενο κεφάλαιο. Εδώ απλά θα δώσουμε κάτι σαν ορισμό για τις τυπικές αλλά και σύγχρονες απαιτήσεις που πρέπει να ικανοποιεί ένα μοντέλο καύσης για αεριοστρόβιλους.

Κατ' αρχήν πρέπει να υπενθυμίσουμε ότι το εργαζόμενο μέσο στους αεριοστρόβιλους είναι:

- Αέρας, ξηρός ή υγρός, στο ψυχρό τμήμα της μηχανής (πριν το θάλαμο καύσης).
- Καυσαέρια στο θερμό τμήμα της μηχανής (μετά το θάλαμο καύσης).

Επομένως συμπεραίνουμε ότι ένα υπολογιστικό μοντέλο εργαζόμενου μέσου πρέπει να λαμβάνει υπόψη τις θερμοδυναμικές ιδιότητες και των δύο παραπάνω μέσων. Το όλο ενδιαφέρον φυσικά επικεντρώνεται στη μοντελοποίηση των καυσαερίων που έχουν προκύψει από την καύση κάποιου καυσίμου στο θάλαμο καύσης καθώς η καύση περιγράφεται από πολυπλοκότερα φαινόμενα και σχέσεις από αυτά που αντιστοιχούν π.χ. στη συμπίεση του αέρα. Επιπλέον το καυσαέριο έχει σύσταση που μεταβάλλεται συνεχώς μέσα στη μηχανή σε αντίθεση με τον αέρα.

Έτσι λοιπόν η ακριβής μοντελοποίηση της καύσης συμβάλει στην ανάπτυξη ενός αξιόπιστου υπολογιστικού μοντέλου εργαζόμενου μέσου για αεριοστρόβιλους καθώς οδηγούμαστε σε αρκετά καλύτερη εκτίμηση της σύστασης και των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων των καυσαερίων (σε σχέση με τις συμβατικές μεθόδους) κάτι που είναι σημαντικό:

- Για την εκτίμηση των εκλυόμενων ρυπαντών στο περιβάλλον (NO_x, CO, UHC).

- Στον ακριβέστερο υπολογισμό των παραμέτρων κύκλου (T,P) καθώς και των επιδόσεων της μηχανής (SFC, ώση κτλ.) σε συνδυασμό βέβαια με το κατάλληλο λογισμικό προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων.
- Στην δυνατότητα μελέτης της καύσης εναλλακτικών καυσίμων (βιοκαύσιμα, φυσικό αέριο, υδρογόνο κλπ.).
- Τέλος μπορούμε να μελετήσουμε πιο διεξοδικά την επίδραση συστατικών του καυσαερίου όπως τα οξείδια του θείου και του αζώτου που προκαλούν διάβρωση στα πτερύγια του στροβίλου καθώς και στο τμήμα εξαγωγής της μηχανής.

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι για την υπολογιστική προσομοίωση της καύσης καθεμία από τις οποίες εισάγει διαφορετική ακρίβεια στα αποτελέσματα. Η απλούστερη προσέγγιση είναι αυτή της πλήρους καύσης και περιγράφεται από τον Τσαλαβούτα στο [4]. Στη διδακτορική αυτή διατριβή εξετάζεται μεταξύ άλλων η επίδραση που έχει η ατμοσφαιρική υγρασία του αέρα και η σύνθεση του καυσίμου στο παραγόμενο καυσαέριο και επισημαίνονται τα σημαντικά σφάλματα που εισάγονται στη λειτουργική κατάσταση της μηχανής άρα και στην αξιοπιστία των διαγνωστικών μεθόδων άμα αγνοηθούν οι παράμετροι αυτοί. Επίσης στο [5] παρουσιάζεται από τον Τσαλαβούτα και τον Μαθιουδάκη μια μέθοδος βασισμένη στις αρχές της προσαρμοστικής μοντελοποίησης για τη βέλτιστη εκτίμηση των παραγόμενων ρύπων από αεριοστρόβιλο σε περίπτωση που έχουμε ορισμένα πειραματικά δεδομένα για τη μηχανή που εξετάζουμε.

Περισσότερο ακριβής μοντελοποίηση της καύσης γίνεται με τη χημική ισορροπία (μοντέλο μηδενικής διάστασης) η οποία μας δίνει τη δυνατότητα να λάβουμε υπόψη τη χημική διάσταση των προϊόντων οξείδωσης των καυσίμων. Η χημική ισορροπία είναι το βασικό αντικείμενο μελέτης αυτής της διπλωματικής και περιγράφεται αναλυτικά στις αναφορές [6], [7] και [8]. Στις αναφορές [9] & [10] γίνεται μια λεπτομερής ανάλυση για την επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του παραγόμενου καυσαερίου καθώς και σε επίπεδο συνιστώσας αεριοστρόβιλου, σε επίπεδο μηχανής και σε επίπεδο αεροσκάφους.

Το πιο ακριβές μοντέλο καύσης είναι αυτό της χημικής κινητικής (μοντέλο μονοδιάστατο, δισδιάστατο ή και τρισδιάστατο ανάλογα το λογισμικό) το οποίο περιλαμβάνει επιπλέον της χημικής ισορροπίας και μελέτη της κινητικής των

αντιδράσεων. Στις αναφορές [6], [8] και [11] αναλύεται εκτενώς το μοντέλο αυτό. Λόγω των πολύπλοκων εξισώσεων που διέπουν τη χημική κινητική και λόγω των υψηλών χρόνων σύγκλισης της μεθόδου, η χημική ισορροπία εξακολουθεί να εφαρμόζεται στην πλειονότητα των μοντέλων προσομοίωσης της καύσης.

1.3 Στόχοι και δομή παρούσας διπλωματικής εργασίας

Στόχοι της παρούσας εργασίας ήταν:

- ✓ Η μελέτη των μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση της καύσης στον υπολογιστή και η ανάδειξη της σημασίας για τη χρήση ενός πιο προηγμένου μοντέλου από αυτό της πλήρους καύσεως όπως είναι η χημική ισορροπία με διάσταση των προϊόντων της καύσης.
- ✓ Η επέκταση των δυνατοτήτων του λογισμικού προσομοίωσης αεριοστροβίλων PROOSIS με τη δημιουργία μοντέλων εργαζόμενου μέσου από το NASA CEA για διάφορα συμβατικά καύσιμα πέραν του Jet-A (Diesel, φυσικό αέριο κτλ.) ή εναλλακτικά (βιοκαύσιμα).
- ✓ Η μελέτη της επίδρασης της σύνθεσης του καυσίμου και της χημικής διάστασης σ' επίπεδο μηχανής.

Η εργασία αποτελείται από πέντε κεφάλαια και τα συμπεράσματα.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι διάφορες μέθοδοι μοντελοποίησης της καύσης. Δίνεται έμφαση στην περιγραφή της χημικής ισορροπίας - διάστασης καθώς και στο πως αυτή μοντελοποιείται στον υπολογιστή μέσω λογισμικού χημικής ισορροπίας όπως το CEA της NASA που είναι και το βασικό εργαλείο αυτής της διπλωματικής. Επίσης περιγράφονται συνοπτικά τα διαθέσιμα λογισμικά (ελεύθερα ή στο εμπόριο) για καθεμία από τις παραπάνω μεθόδους μοντελοποίησης της καύσης, με έμφαση βεβαίως στη χημική ισορροπία, ενώ γίνεται μια αναφορά στα διάφορα προγράμματα προσομοίωσης της λειτουργίας των αεριοστροβίλων.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται αρχικά μια απαρίθμηση των δυνατοτήτων και των χαρακτηριστικών του NASA CEA. Έπειτα αναλύεται η βασική του δομή και γίνεται μια βήμα προς βήμα ανάλυση για το πώς δημιουργείται το αρχείο εισόδου για το πρόγραμμα είτε σε περίπτωση που όλα τα αντιδρώντα (καύσιμο και οξειδωτικό) βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA είτε στην περίπτωση που

κάποιο από αυτά δεν βρίσκεται σ' αυτή. Παρουσιάζονται κάποιοι υπολογιστικές κώδικες που δημιουργήθηκαν για τη 2^η περίπτωση. Τέλος γίνεται μια μελέτη για την επίδραση της χημικής διάστασης στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου χρησιμοποιώντας το CEA.

Στο τέταρτο κεφάλαιο γίνεται παρουσίαση του PROOSIS που είναι ένα λογισμικό μοντελοποίησης της λειτουργίας των αεριοστρόβιλων. Ύστερα περιγράφεται λεπτομερώς η διαδικασία δημιουργίας πινάκων, με τις ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου, για το PROOSIS μέσω του NASA CEA και ενός προγράμματος γραμμένο σε Fortran. Στη συνέχεια παρουσιάζονται κάποια ενδεικτικά τρεξίματα που έγιναν για τον κινητήρα CFM56. Τέλος γίνεται μια παραμετρική μελέτη ως προς τη σύσταση του καυσίμου και την επίδραση της χημικής διάστασης στον κινητήρα GTAC (με ενδιάμεση ψύξη) για να μελετήσουμε τον αντίκτυπο που έχουν οι παράμετροι αυτοί σε επίπεδο μηχανής.

Τέλος στο πέμπτο κεφάλαιο τονίζονται οι προοπτικές των εναλλακτικών καυσίμων για χρήση είτε ως βασικό είτε ως συμπληρωματικό καύσιμο στους αεριοστρόβιλους καθώς και τις σχετικές δυσκολίες που προκύπτουν. Παρατίθενται τα βιοκαύσιμα τα οποία μοντελοποιήθηκαν προκειμένου να κάνουμε προσομοίωση της καύσης τους και κάνουμε σύγκριση με τα συμβατικά καύσιμα. Τέλος μελετάμε την επίδραση που έχουν σε επίπεδο μηχανής με τον κινητήρα GTAC.

2. Επισκόπηση Μεθόδων Μοντελοποίησης Καύσης και Διαθέσιμα Λογισμικά

Το κεφάλαιο αυτό ξεκινά με μια ανάλυση των μεθόδων, κατ' αύξουσα ακρίβεια και πολυπλοκότητα, για την προσομοίωση της καύσης. Από το απλό μοντέλο της πλήρους καύσης προχωρά με την επεξήγηση της χημικής ισορροπίας ενώ γίνεται και αναφορά στη χημική κινητική. Τέλος παρουσιάζονται συνοπτικά τα διαθέσιμα λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης, με έμφαση στα λογισμικά χημικής ισορροπίας αλλά και τα διάφορα προγράμματα μοντελοποίησης της λειτουργίας ολόκληρης της μηχανής.

2.1 Επισκόπηση μεθόδων μοντελοποίησης της καύσης

2.1.1 Θερμικός ισολογισμός – Πλήρης καύση

Στο απλούστερο επίπεδο ανάλυσης η οξειδωση του καυσίμου στο θάλαμο καύσης περιγράφεται από τον ισολογισμό ενέργειας ανά μονάδα μάζας εισερχόμενου αέρα [3]:

$$(1 + FAR) \times (h_{tg4} - h_{tgr}) = (h_{ta3} - h_{tar}) + \eta_b \times FAR \times LHV + FAR \times (h_{fTf} - h_{fr}) \quad (2.1)$$

με LHV η θερμογόνος δύναμη του καυσίμου σε μια θερμοκρασία T

h_{tg4} , h_{tgr} η ειδική ενθαλπία του καυσαερίου στην τελική θερμοκρασία της καύσης και στη θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα

h_{ta3} , h_{tar} η ειδική ενθαλπία του αέρα στη θερμοκρασία εισόδου στο θάλαμο καύσης και στη θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα

h_{fTf} , h_{fr} η ειδική ενθαλπία του καυσίμου στη θερμοκρασία προσαγωγής του στο θάλαμο καύσης και στη θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα

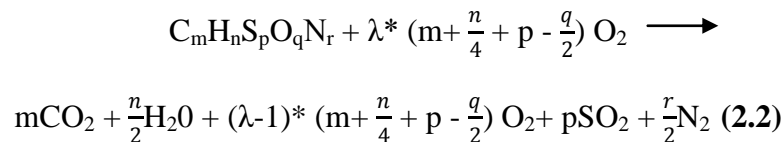
η_b ο βαθμός απόδοσης της καύσης

όπου συνήθως γίνεται η παραδοχή των τελείων αερίων (C_p , γ σταθερά) για τον αέρα και το καυσαέριο και πιο σπάνια των ιδανικών αερίων (C_p, γ εξαρτώνται από τη

θερμοκρασία και πιο συγκεκριμένα από τη μέση θερμοκρασία του εκάστοτε τμήματος της μηχανής).

Με την μέθοδο αυτή ωστόσο δεν υπολογίζονται αναλυτικά οι εκπομπές κάθε ρυπαντή. Επίσης τα σφάλματα που εισάγονται από την υπόθεση των τελείων αερίων μπορεί ενδεικτικά να φτάσουν το 30% για Cr και 5% για το γ [9].

Σε επίπεδο προσομοίωσης (υπολογιστικά μοντέλα) η σύνθεση του καυσαερίου υπολογίζεται από τις χημικές αντιδράσεις πλήρης καύσης καυσίμου γνωστής σύνθεσης (με γνωστό δηλαδή μοριακό τύπο) με αέρα επίσης γνωστής σύνθεσης [4], [9]:



με λ τον λόγο ισοδυναμίας αέρα καύσεως :

$$\lambda = \frac{FAR_{stoic h}}{FAR} \quad (2.3)$$

από την οποία προκύπτουν οι κατά μάζα συστάσεις του κάθε ρύπου στο καυσαέριο. Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου (είτε αέρας είτε καυσαέριο) γίνεται με την παραδοχή των ιδανικών αερίων.

Λέγοντας πλήρη καύση εννοούμε ότι τα προϊόντα της καύσης δεν επιδέχονται περαιτέρω οξείδωση.

Στην εξίσωση (2.2) βασίζονται τα μοντέλα που κάνουν προσομοίωση της καύσης αγνοώντας την επίδραση της χημικής διάστασης (no dissociation models). Βασίζονται δηλαδή στην υπόθεση της σταθερής σύστασης του εργαζόμενου μέσου ανεξάρτητα από τη θερμοκρασία. Η σύσταση επιτρέπεται ν' αλλάξει μόνο όταν συμβαίνει καύση ή ανάμειξη (με αέρα, νερό, κλπ.) Το καυσαέριο μπορεί να περιέχει μόνο:

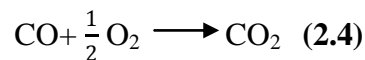
- CO₂
- H₂O
- SO₂ και N₂ που προέρχονται από το καύσιμο (αν βέβαια στο μοριακό του τύπο περιέχονται άτομα S και N)

- O_2 εάν η καύση είναι φτωχή ($\lambda > 1$) ή και Ar και N_2 εάν ο αέρας που οξειδώνει το καύσιμο δεχτούμε ότι περιέχει αργόν και άζωτο επιπλέον του οξυγόνου

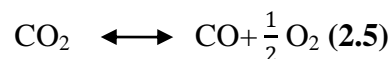
Με βάση αυτό το μοντέλο γίνεται η σύγκριση με το μοντέλο της πλήρους χημικής διάστασης στο επόμενο κεφάλαιο για να τονισθεί η επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου.

2.1.2 Περιγραφή χημικής ισορροπίας- διάστασης

Στην πραγματικότητα κατά την καύση ενός καυσίμου ΔΕΝ συμβαίνει η απλοϊκή αντίδραση που είδαμε προηγουμένως (2.2) αλλά μια σειρά από πολύπλοκες χημικές αντιδράσεις μία από τις οποίες π.χ. είναι και η:



Όταν η αντίδραση αυτή γίνεται κατά τη διεύθυνση του βέλους συνοδεύεται από έκλυση ενέργειας με αποτέλεσμα την ανύψωση της θερμοκρασίας. Όμως σε θερμοκρασίες άνω των 1500K (που επιτυγχάνονται εύκολα στους σύγχρονους θαλάμους καύσης αεροστροβίλων) μόρια CO_2 δίστανται (dissociation) σε μόρια CO και O_2 , αντίδραση η οποία συνοδεύεται από απορρόφηση ενέργειας και έτσι τελικά χαμηλώνει η θερμοκρασία της καύσης. Δηλαδή στην πραγματικότητα έχουμε την αντίδραση:



Χημική ισορροπία για κάθε αντίδραση προκύπτει όταν οι ταχύτητες της προς τα δεξιά και αριστερά αντιδράσεως γίνονται ίσες. Παρόμοια συμπεράσματα εξάγονται και για τις υπόλοιπες αντιδράσεις με αποτέλεσμα το τελικό σύστημα των εξισώσεων που κυρίως αντικατοπτρίζουν την εικόνα της καύσης να είναι:

- $CO + \frac{1}{2} O_2 \longleftrightarrow CO_2 \quad (2.6)$
- $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \longleftrightarrow H_2O \quad (2.7)$
- $OH + \frac{1}{2} H_2 \longleftrightarrow H_2O \quad (2.8)$
- $\frac{1}{2} O_2 \longleftrightarrow O \quad (2.9)$
- $\frac{1}{2} H_2 \longleftrightarrow H \quad (2.10)$



ενώ θα πρέπει να ληφθούν υπόψη μικρές συγκεντρώσεις διαφόρων χημικών στοιχείων και ενώσεων όπως είναι: C_2H_2 , CH_2CO , C_2H_3 , CH_3CN , CH_3CO , C_2H_4 , $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$, CH_3CHO , CH_3COOH , OHCH_2COOH , C_2H_5 , C_2H_6 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3OCH_3 , $\text{CH}_3\text{O}_2\text{CH}_3$, CCN , CNC , OCCN , C_2N_2 , C_2O , C_3 , C_3H_3 , C_3H_4 , C_3H_5 , C_3H_6 , $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$, C_3H_7 , C_3H_8 , CNCOCN , C_3O_2 , C_4 , C_4H_2 , C_4H_4 , C_4H_6 , C_4H_8 , C_4H_9 , C_4H_{10} , C_4N_2 , C_5 , C_5H_6 ,..., HCN , HCO , HNO , HCHO , HCOOH , HO_2 , H_2O_2 ,..., N , NCO , NH , NH_2 , NH_3 , NH_2OH , NO_3 , NCN , N_2 , N_3 ,...

Αποδεικνύεται με τη βοήθεια του II Θερμοδυναμικού Αξιώματος ότι η συνθήκη για επίτευξη χημικής ισορροπίας σε ένα απομονωμένο σύστημα σταθερής μάζας, όγκου και εσωτερικής ενέργειας είναι:

$$(dS)_{U,V,m} = 0 \quad (2.12)$$

Ωστόσο επειδή η παραπάνω έκφραση δεν είναι ιδιαίτερα πρακτική ορίζουμε την ενέργεια Gibbs με τη σχέση:

$$G = H - T \cdot S \quad (2.13)$$

οπότε η συνθήκη χημικής ισορροπίας για σύστημα δοσμένης θερμοκρασίας, πίεσης και μάζας γίνεται:

$$(dG_{\text{mix}})_{T,P,m} = 0 \quad (2.14)$$

Για ένα μείγμα ιδανικών αερίων η συνάρτηση Gibbs δίνεται από τη σχέση:

$$G_{\text{mix}} = \sum N_i \cdot \bar{g}_{i,T} = \sum N_i \cdot [\bar{g}_{i,T}^0 + R_u \cdot T \cdot \ln(P_i/P^0)] \quad (2.15)$$

όπου N_i ο αριθμός των moles του i στοιχείου του μείγματος

R_u η παγκόσμια σταθερά των αερίων

P_i η μερική πίεση του i στοιχείου του μείγματος

P^0 η ατμοσφαιρική πίεση = 1 atm

$\bar{g}_{i,T}^0$ η συνάρτηση Gibbs του i στοιχείου του μείγματος στην ατμοσφαιρική πίεση (συνθήκη αναφοράς) η οποία δίνεται από τη σχέση:

$$\bar{g}_{i,T}^0 = (\bar{g}_{f,i}^0)_{T_{\text{ref}}} + [\bar{g}_i^0(T) - \bar{g}_i^0(T_{\text{ref}})] \quad (2.16)$$

με $(\bar{g}_{f,i}^0)_{T_{ref}}$ η συνάρτηση Gibbs σχηματισμού σε θερμοκρασία αναφοράς (συνήθως 298.15K). Το μέγεθος αυτό συνήθως δίδεται πινακοποιημένο ανάλογα με τη θερμοκρασία αναφοράς κ'

$\bar{g}_i^0(T) - \bar{g}_i^0(T_{ref})$ η αισθητή διαφορά συνάρτησης Gibbs από T_{ref} σε T . Το μέγεθος αυτό είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας. Επομένως και η συνάρτηση Gibbs του i στοιχείου του μείγματος, $\bar{g}_{i,T}^0$, είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας.

Εφαρμόζοντας τις εξισώσεις (2.14) κ' (2.15) στη γενική εξίσωση αντίδρασης:



και ορίζοντας τις ποσότητες:

- Διαφορά των συναρτήσεων Gibbs σε συνθήκες αναφοράς μεταξύ προϊόντων και αντιδρώντων (εξάρτηση μόνο από τη θερμοκρασία)

$$\Delta G_T^0 = (e^* \bar{g}_{E,T}^0 + f^* \bar{g}_{F,T}^0 + \dots - a^* \bar{g}_{A,T}^0 - b^* \bar{g}_{B,T}^0 - \dots) \quad (2.18)$$

- Σταθερά ισορροπίας

$$K_P = \frac{(P_E/P^0)^e \times (P_F/P^0)^f \times \dots}{(P_A/P^0)^a \times (P_B/P^0)^b \times \dots} \quad (2.19)$$

- Μερικές πιέσεις

$$P_i = x_i^* P \quad (i = a, b, f, e, \dots) \quad (2.20)$$

όπου P η ολική πίεση του μείγματος

προκύπτει τελικά η σχέση:

$$\Delta G_T^0 = -R_u^* T^* \ln K_P \longleftrightarrow K_P = \exp(-\Delta G_T^0 / R_u^* T) \quad (2.21)$$

Έχοντας επομένως:

- Την εξίσωση της σταθεράς ισορροπίας (2.21) για κάθε αντίδραση [την ποσότητα ΔG_T^0 την υπολογίζουμε από την εξίσωση (2.18) ενώ την K_P την αντικαθιστούμε από τις (2.19) & (2.20)] με άγνωστες μόνο τις γραμμομοριακές συστάσεις x_i αν γνωρίζουμε τη θερμοκρασία και την πίεση του μείγματος (μη γραμμικές εξισώσεις)
- Το χημικό ισοζύγιο ατόμων C, H, O και N (γραμμικές εξισώσεις)

– Την εξίσωση $\sum x_i = 1$ ή $(\sum Y_i = 1)$ (2.22)

δημιουργείται ένα σύστημα εξισώσεων, γραμμικών και μη, το οποίο μπορεί να επιλυθεί με μια επαναληπτική μέθοδο όπως είναι η Newton – Raphson και να μας δώσει τη γραμμομοριακή (ή την κατά μάζα) σύσταση των προϊόντων της καύσης x_i (ή Y_i αντίστοιχα) στο καυσαέριο. Κάποιες φορές ωστόσο παρουσιάζονται προβλήματα συγκλίσεως.

Στη συνέχεια και κάνοντας την υπόθεση των ιδανικών αερίων μπορούμε να υπολογίσουμε τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του μείγματος από σχέσεις της μορφής:

$$\bar{h}_{mix}(T) = \sum_i x_i \times \bar{h}_i(T) \quad (2.23)$$

$$\bar{u}_{mix}(T) = \sum_i x_i \times \bar{u}_i(T) \quad (2.24)$$

Παρατηρούμε ότι οι ιδιότητες αυτές, με την υπόθεση των ιδανικών αερίων, δεν εξαρτώνται από την πίεση. Η εντροπία του μείγματος υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\bar{s}_{mix}(T, P) = \sum_i x_i \times \bar{s}_i(T, P_i) \quad (2.25)$$

Στην περίπτωση αυτή παρατηρούμε ότι η εντροπία τόσο του μείγματος όσο και των επιμέρους στοιχείων εξαρτώνται από τις πιέσεις. Οι επιμέρους εντροπίες μπορούν να εκτιμηθούν από τις τιμές στην πίεση αναφοράς, συνήθως $P_{ref} = 1\text{bar}$:

$$\bar{s}_i(T, P_i) = \bar{s}_i(T, P_{ref}) - R_u \times \ln \frac{P_i}{P_{ref}} \quad (2.26)$$

Από το παράδειγμα που ακολουθεί [6] θα γίνει πιο κατανοητή η παραπάνω διαδικασία.

Στην αντίδραση (2.5) μας ζητείται να βρούμε τη σύνθεση του μείγματος δηλαδή την αναλογία κατά mole των CO_2 , CO και O_2 που προκύπτουν από τη διάσταση του αμιγώς αρχικά CO_2 για διάφορες θερμοκρασίες $T = 1500, 2000, 25000$ και 3000K και πιέσεις $P = 0.1, 1, 10$ και 100atm .

Για να βρούμε τις άγνωστες αναλογίες mole x_{CO_2} , x_{CO} και x_{O_2} χρειαζόμαστε τρεις εξισώσεις όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως. Η πρώτη είναι η έκφραση για τη σταθερά ισορροπίας (2.21). Οι άλλες δύο εξισώσεις θα προέρχονται από τις εκφράσεις για διατήρηση των στοιχείων οι οποίες δηλώνουν ότι το συνολικό ποσό των ατόμων C και O είναι σταθερό, ανεξάρτητα του πως είναι διανεμημένα στα τρία αυτά είδη, αφού το αρχικό μείγμα ήταν αμιγώς CO_2 .

Υπολογίζουμε τη διαφορά των συναρτήσεων Gibbs σε συνθήκες αναφοράς από την (2.18). Για παράδειγμα για $T = 2500\text{K}$ έχουμε:

$$\begin{aligned}\Delta G_T^{\circ} &= \left[\left(\frac{1}{2}\right) * \bar{g}_{O_2,T}^{\circ} + (1) * \bar{g}_{CO,T}^{\circ} - (1) * \bar{g}_{CO_2,T}^{\circ}\right]_{T_{ref}=2500} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)*0 + (1)*(-327,245) - (-396,152) \\ &= 68,907 \text{ kJ/kmol} \quad \mathbf{(2.27)}\end{aligned}$$

Οι παραπάνω τιμές πάρθηκαν από την αναφορά [6] πίνακες A.1, A.2 και A.11.

Από τον ορισμό της σταθεράς ισορροπίας K_p (2.19) έχουμε:

$$K_p = \frac{(P_{CO}/P^0)^1 \times (P_{O_2}/P^0)^{0.5}}{(P_{CO_2}/P^0)^1} \quad \mathbf{(2.28)}$$

Μπορούμε με τη σχέση (2.20) να εκφράσουμε την K_p σε όρους αναλογίας κατά mole:

$$K_p = \frac{x_{CO} \times x_{O_2}^{0.5}}{x_{CO_2}} \times (P/P^0)^{0.5} \quad \mathbf{(2.29)}$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω εξίσωση (2.29) στην (2.21) έχουμε:

$$\begin{aligned}\frac{x_{CO} \times x_{O_2}^{0.5}}{x_{CO_2}} \times (P/P^0)^{0.5} &= \exp\left(\frac{-\Delta G_T^{\circ}}{R_u * T}\right) = \exp\left(\frac{-68,907}{(8.315) \times (2500)}\right) \\ \frac{x_{CO} \times x_{O_2}^{0.5}}{x_{CO_2}} \times (P/P^0)^{0.5} &= 0.03635 \quad \mathbf{(2.30)}\end{aligned}$$

Δημιουργούμε μια δεύτερη εξίσωση για να εκφράσουμε τη διατήρηση των στοιχείων:

$$\frac{\text{αριθμ ός ατόμων άνθρακα}}{\text{αριθμ ός ατόμων οξυγόνου}} = \frac{1}{2} = \frac{x_{CO} + x_{CO_2}}{x_{CO} + 2 \times x_{CO_2} + 2 \times x_{O_2}} \quad \mathbf{(2.31)}$$

Μπορούμε να κάνουμε το πρόβλημα πιο γενικό ορίζοντας το λόγο C/O να είναι η παράμετρος Z η οποία μπορεί να πάρει διάφορες τιμές ανάλογα με την αρχική σύσταση του μείγματος:

$$Z = \frac{x_{CO} + x_{CO_2}}{x_{CO} + 2 \times x_{CO_2} + 2 \times x_{O_2}} \quad \mathbf{(2.32)}$$

$$\text{ή } (Z-1) x_{CO} + (2Z-1) x_{CO_2} + 2Z x_{O_2} = 0 \quad \mathbf{(2.33)}$$

Η τρίτη και τελευταία εξίσωση που εκφράζει τη διατήρηση των moles απαιτεί το άθροισμα των συστάσεων κατά moles να είναι μονάδα δηλαδή:

$$\sum x_i = 1 \quad (2.34)$$

$$\text{ή } x_{\text{CO}_2} + x_{\text{CO}} + x_{\text{O}_2} = 1 \quad (2.35)$$

Ταυτόχρονη επίλυση των εξισώσεων (2.30), (2.33) και (2.35) για τις καθορισμένες τιμές των θερμοκρασιών T , των πιέσεων P και της παραμέτρου Z μας δίνει την τιμές των αναλογιών x_{CO_2} , x_{CO} και x_{O_2} . Χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (2.33) και (2.35) για να απαλείψουμε τις x_{CO_2} και x_{O_2} η εξίσωση (2.30) γίνεται:

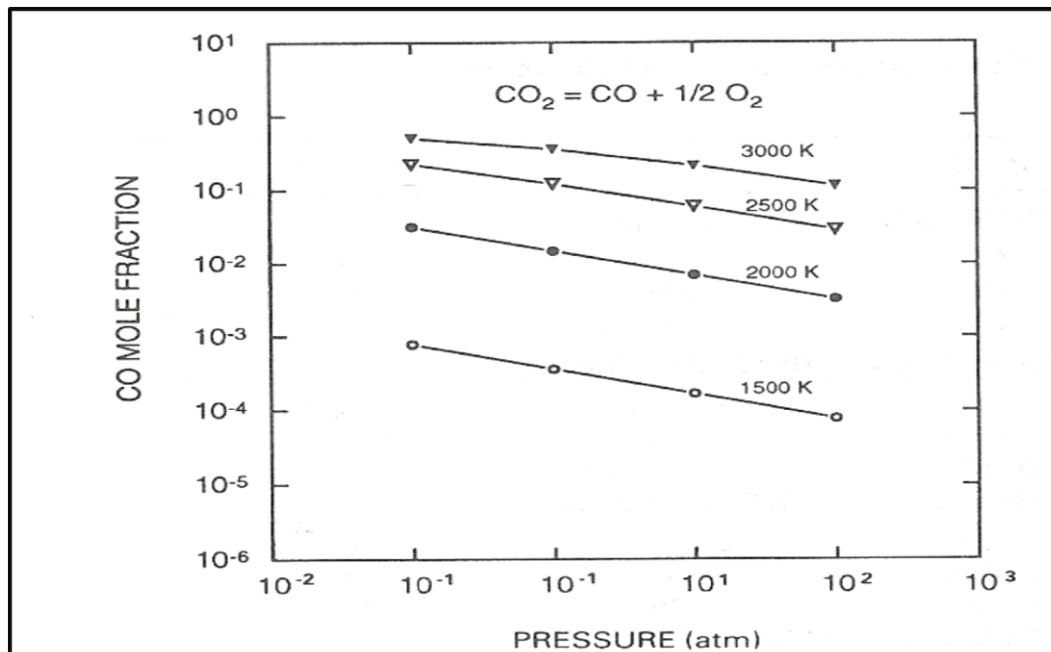
$$x_{\text{CO}} \cdot (1 - 2 \cdot Z + Z \cdot x_{\text{CO}})^{0.5} \cdot (P/P^0)^{0.5} - [2 \cdot Z - (1 + Z) \cdot x_{\text{CO}}] \cdot \exp[-\Delta G_T^0 / (R_u \cdot T)] = 0 \quad (2.36)$$

Η παραπάνω εξίσωση για το x_{CO} μπορεί εύκολα να επιλυθεί εφαρμόζοντας την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson. Οι άγνωστες ποσότητες x_{CO_2} και x_{O_2} λαμβάνονται τότε από τις εξισώσεις (2.33) και (2.35).

Στα ακόλουθα σχήματα φαίνονται τα αποτελέσματα για τις τέσσερις θερμοκρασίες και πιέσεις που ζητήθηκαν καθώς και η επίδραση της θερμοκρασίας και της πίεσεως στη γραμμομοριακή αναλογία του CO.

Equilibrium compositions at various temperatures and pressures for $\text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2$				
	$P = 0.1 \text{ atm}$	$P = 1$	$P = 10$	$P = 100$
$T = 1500 \text{ K}, \Delta G_T^0 = 1.5268 \cdot 10^8 \text{ J/kmol}$				
x_{CO}	$7.755 \cdot 10^{-4}$	$3.601 \cdot 10^{-4}$	$1.672 \cdot 10^{-4}$	$7.76 \cdot 10^{-5}$
x_{CO_2}	0.9988	0.9994	0.9997	0.9999
x_{O_2}	$3.877 \cdot 10^{-4}$	$1.801 \cdot 10^{-4}$	$8.357 \cdot 10^{-5}$	$3.88 \cdot 10^{-5}$
$T = 2000 \text{ K}, \Delta G_T^0 = 1.10462 \cdot 10^8 \text{ J/kmol}$				
x_{CO}	0.0315	0.0149	$6.96 \cdot 10^{-3}$	$3.243 \cdot 10^{-3}$
x_{CO_2}	0.9527	0.9777	0.9895	0.9951
x_{O_2}	0.0158	0.0074	$3.48 \cdot 10^{-3}$	$1.622 \cdot 10^{-3}$
$T = 2500 \text{ K}, \Delta G_T^0 = 6.8907 \cdot 10^7 \text{ J/kmol}$				
x_{CO}	0.2260	0.1210	0.0602	0.0289
x_{CO_2}	0.6610	0.8185	0.9096	0.9566
x_{O_2}	0.1130	0.0605	0.0301	0.0145
$T = 3000 \text{ K}, \Delta G_T^0 = 2.7878 \cdot 10^7 \text{ J/kmol}$				
x_{CO}	0.5038	0.3581	0.2144	0.1138
x_{CO_2}	0.2443	0.4629	0.6783	0.8293
x_{O_2}	0.2519	0.1790	0.1072	0.0569

Σχήμα 2.1: Γραμμομοριακές αναλογίες CO, CO₂ και O₂ για τις πιέσεις και τις θερμοκρασίες του παραδείγματος.



Σχήμα 2.2: Γραφική παράσταση γραμμομοριακής αναλογίας CO συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης της καύσης.

Δύο γενικές παρατηρήσεις που αφορούν τα αποτελέσματα μπορούν να γίνουν: Το πρώτο είναι ότι σε καθορισμένη θερμοκρασία, αύξηση της πίεσης μειώνει τη διάσταση του CO_2 σε CO και O_2 και το δεύτερο ότι αύξηση της θερμοκρασίας σε καθορισμένη πίεση προωθεί τις αντιδράσεις διάστασης.

Οι δύο αυτές επισημάνσεις συνάδουν με την αρχή του LeChatelier σύμφωνα με την οποία «Η ισορροπία ενός συστήματος πάντοτε μετατίθεται κατά τέτοιο τρόπο ώστε να ελαχιστοποιηθούν οποιεσδήποτε μεταβολές επιβλήθηκαν απ' έξω στο σύστημα (π.χ. αύξηση της θερμοκρασία ή της πίεσεως)». Έτσι στην αντίδραση (2.5) επειδή οι αντιδράσεις διάστασης των προϊόντων (προς τα μπρος) είναι ενδόθερμες, μια αύξηση στη θερμοκρασία των προϊόντων της καύσης θα ευνοήσει την προς τα μπρος αντίδραση (ώστε να αποβληθεί θερμότητα) και έτσι θα έχουμε μεγαλύτερη παρουσία προϊόντων χημικής διάστασης. Επίσης στην αντίδραση αυτή παρατηρούμε ότι στα αριστερά έχουμε συνολικά 1 mole CO_2 ενώ στα δεξιά 1,5 moles CO & O_2 . Γενικά σε κάθε αντίδραση η αναλογία mole είναι και αναλογία μερικών πιέσεων. Επομένως μια αύξηση στην πίεση θα «ευνοήσει» την προς τα πίσω αντίδραση με αποτέλεσμα να μειωθούν τα επίπεδα των προϊόντων χημικής διάστασης.

Η ανάλυση που έγινε προηγουμένως εστίασε σε μια απλή κατάσταση όπου έχουμε μια αντίδραση ισορροπίας. Ωστόσο στις περισσότερες περιπτώσεις των συστημάτων καύσης έχουμε πολλά είδη και αρκετές αντιδράσεις ισορροπίας που είναι σημαντικές.

Θα μπορούσαμε βέβαια με την αντίδραση που είδαμε προηγουμένως για τη διάσταση του CO_2 να ενσωματώσουμε και άλλες αντιδράσεις στο σύστημά μας. Για παράδειγμα η αντίδραση $\text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O}$ είναι αρκετά πιθανό να είναι σημαντική για τις συνήθεις θερμοκρασίες καύσης. Συμπεριλαμβάνοντας αυτή την αντίδραση προκύπτει ένας μόνο επιπλέον άγνωστος, x_{O} .

Μπορούμε εύκολα να προσθέσουμε μια επιπλέον εξίσωση για να λάβουμε υπόψη τη διάσταση του O_2 :

$$\frac{x_{\text{O}}^2}{x_{\text{O}_2}} \times (P/P^0) = \exp\left(\frac{-\Delta G_{\text{T}}^{0'}}{R_u * T}\right) \quad (2.37)$$

όπου $\Delta G_{\text{T}}^{0'}$ είναι η κατάλληλη διαφορά των συναρτήσεων Gibbs σε συνθήκες αναφοράς για την αντίδραση $\text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O}$. Η έκφραση για τη διατήρηση των στοιχείων (2.33) διαμορφώνεται κατάλληλα για να συμπεριλάβει τα επιπλέον είδη που περιέχουν O :

$$\frac{\text{αριθμός ατόμων άνθρακα}}{\text{αριθμός ατόμων οξυγόνου}} = \frac{x_{\text{CO}} + x_{\text{CO}_2}}{x_{\text{CO}} + 2x_{\text{CO}_2} + 2x_{\text{O}_2} + x_{\text{O}}} \quad (2.38)$$

και η διατήρηση των mole (2.35) δίνει:

$$x_{\text{CO}_2} + x_{\text{CO}} + x_{\text{O}_2} + x_{\text{O}} = 1 \quad (2.39)$$

Τώρα έχουμε για επίλυση ένα σύνολο τεσσάρων γραμμικών και μη γραμμικών εξισώσεων με τέσσερις αγνώστους το οποίο μπορεί να επιλυθεί με τη γενικευμένη μέθοδο Newton-Raphson η οποία εφαρμόζεται εύκολα σε τέτοια συστήματα.

Με την ίδια λογικά μπορούν να ενσωματωθούν και άλλες αντιδράσεις ώστε να περιγράφεται ακριβέστερα η εικόνα της καύσης. Η επίλυση τέτοιων συστημάτων γίνεται μόνο στον ηλεκτρονικό υπολογιστή με τα κατάλληλα λογισμικά που περιγράφονται σε επόμενη ενότητα.

2.1.3 Χημική κινητική

Θεωρητικά εξαιτίας της εκτόνωσης του καυσαερίου στο στρόβιλο και της μεγάλης πτώσης της θερμοκρασίας που αυτό συνεπάγεται, θα περιμέναμε τα προϊόντα της χημικής διάστασης να εξαφανίζονταν (LeChatelier) και θα είχαμε μόνο τα προϊόντα που προκύπτουν από την πλήρη οξειδωση του καυσίμου.

Η ανάλυση όμως που προηγήθηκε για τη χημική διάσταση έγινε με την προϋπόθεση ότι υπάρχει επαρκές χρονικό διάστημα για φτάσουμε σε χημική ισορροπία. Συνήθως όμως το μείγμα καυσίμου-οξειδωτικού παραμένει για πολύ μικρό διάστημα στο θάλαμο καύσης. Επίσης η επαφή με τα πιο κρύα τοιχώματα του θαλάμου καύσης παγώνει τοπικά τις αντιδράσεις της καύσης.

Και τα δύο αυτά γεγονότα έχουν σαν αποτέλεσμα η διαδικασία της καύσης να περιγράφεται ακριβέστερα από το πολύπλοκο μοντέλο της **χημικής κινητικής**. Εκτός από θερμοδυναμικούς υπολογισμούς, στην χημική κινητική, είναι απαραίτητη η γνώση της γεωμετρίας του θαλάμου καύσης και των ταχυτήτων αντιδράσεως (των σχετικών εξισώσεων) σύμφωνα με τα διδάγματα της ‘Κινητικής των Χημικών Αντιδράσεων’ [8]. Υπολογισμοί αυτού του είδους είναι εξαιρετικά περίπλοκοι και χρονοβόροι, απαιτούν την χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή ενώ μάλλον σπανίζουν τα δεδομένα για τις ταχύτητες των σχετικών αντιδράσεων.

Ο επίδοξος μελετητής μπορεί να βρει περισσότερες πληροφορίες για τη χημική κινητική στις αναφορές [6], [8] και [11].

2.2 Λογισμικό μοντελοποίησης καύσης και προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων

Στην ενότητα αυτή αναλύονται αρχικά τα λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης με έμφαση στα λογισμικά χημικής ισορροπίας άλλα και αυτά της χημικής κινητικής. Τέλος παρατίθενται και κάποια πολύ κοινά χρησιμοποιούμενα προγράμματα προσομοίωσης της λειτουργίας των αεριοστρόβιλων.

2.2.1 Λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης

Μερικά από τα πιο βασικά λογισμικά χημικής ισορροπίας, τα οποία μπορεί κάποιος ελεύθερα να τα κατεβάσει από το διαδίκτυο, είναι:

- **NASA CEA (Chemical Equilibrium with Applications)**

Στα περισσότερα από τα επαγγελματικά λογισμικά μοντελοποίησης λειτουργίας αεριοστρόβιλων που χρησιμοποιούνται στη βιομηχανία και στην έρευνα η μοντελοποίηση της καύσης, όπως θα δούμε στη συνέχεια, γίνεται με το **NASA CEA**. Γι' αυτό και το λογισμικό αυτό θεωρείται παγκοσμίως ως η βάση αναφοράς. Το NASA CEA και οι δυνατότητές του θα μας απασχολήσουν εκτενώς στο επόμενο κεφάλαιο καθώς και σε όλη την υπόλοιπη εργασία.

- **Gaseq**

Στο επόμενο σχήμα φαίνεται το γραφικό περιβάλλον του Gaseq καθώς και ένα ενδεικτικό τρέξιμο που έγινε με το λογισμικό για την αδιαβατική καύση του μείγματος υδρογόνο-αέρας σε σταθερή πίεση.

The screenshot shows the Gaseq software interface. The 'Problem Type' is set to 'Adiabatic T and composition at const P'. The reactants are N2 (0.79000 moles, 0.55634 mol fraction) and H2 (0.42000 moles, 0.29577 mol fraction). The products are N2 (0.79000 moles, 0.64579 mol fraction), H2O (0.39637 moles, 0.32402 mol fraction), O2 (0.00687 moles, 0.00562 mol fraction), H2 (0.01794 moles, 0.01467 mol fraction), OH (0.00913 moles, 0.00747 mol fraction), H (0.00223 moles, 1.83e-03 mol fraction), and O (7.462e-04 moles, 6.10e-04 mol fraction). The temperature is 2389.8 K and the pressure is 1.0 atm. A table of properties is also displayed, including enthalpy, entropy, and various transport properties.

Species	No. Moles	MolFrac	K
N2	0.79000	0.55634	
O2	0.21000	0.14789	
H2	0.42000	0.29577	

Species	No. Moles	MolFrac	K
N2	0.79000	0.64579	
H2O	0.39637	0.32402	
O2	0.00687	0.00562	
H2	0.01794	0.01467	
OH	0.00913	0.00747	
H	0.00223	1.83e-03	
O	7.462e-04	6.10e-04	

Reactants	Products
Temperature, K	2389.8
Pressure, atm	1.0
Volume Products/Reactants	6.8627
Moles Products/Reactants	0.86148
H0, kcal/mol	0.015
S0, cal/mol/K	64.278
Cp, cal/mol/K	10.025
Gamma, Cp/Cv	1.247
Mean Molecular Weight, g	24.28
Density, kg/m3	0.12380
Sound speed, m/s	1010.1
Enthalpy, H, kcal/kg	0.63
Entropy, S, cal/kg/K	2647.60
Intern Energy, U, kcal/kg	-194.99
Free Energy, G, kcal/kg	-6326.71
Cp, cal/kg/K	412.94
Volume, m3	196.108
Molecules/cc	3.07E+18
Moles/cc	5.10E-06
Viscosity, kg/m/s	7.50E-05
Kinematic Visc, m2/s	6.06E-04
ThermCond, cal/m/K/s	3.90E-02
ThDiffusivity, m2/s	7.62E-04

Σχήμα 2.3: Αδιαβατική καύση υδρογόνου με αέρα στο λογισμικό Gaseq.

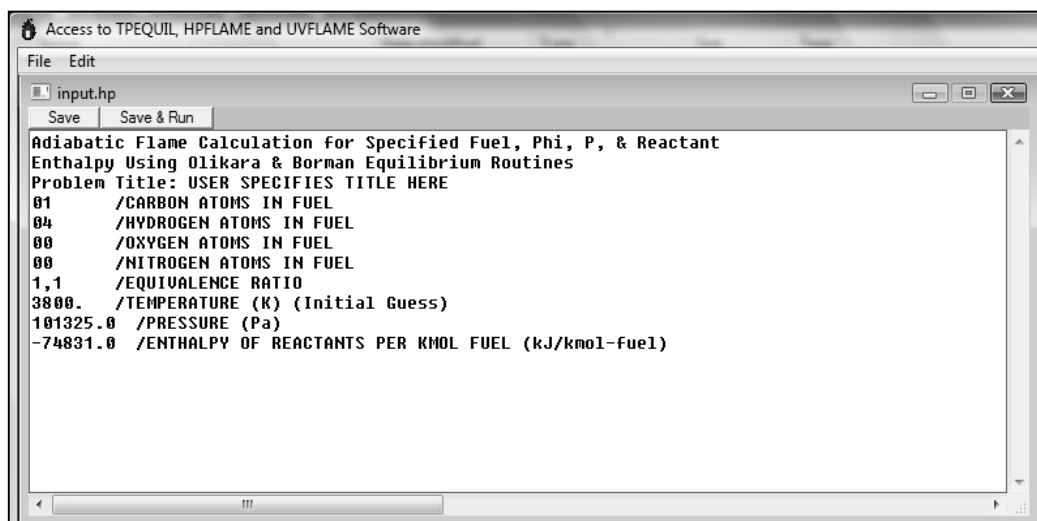
Το Gaseq μας δίνει την ελευθερία να μελετήσουμε διάφορα προβλήματα χημικής ισορροπίας όπως η αδιαβατική καύση σε συγκεκριμένη πίεση που φαίνεται στο σχήμα, η αδιαβατική καύση σε σταθερό όγκο, η επίτευξη χημικής ισορροπίας σε συγκεκριμένη πίεση και θερμοκρασία ή σε συγκεκριμένη θερμοκρασία και όγκο κλπ.

Επίσης το Gaseq μας προσφέρει τη δυνατότητα να πραγματοποιήσουμε υπολογισμούς χημικής ισορροπίας για τα εξής μείγματα αντιδρώντων:

- Μεθάνιο-αέρας
- Υδρογόνο-αέρας
- Προπάνιο-αέρας
- Ισοοκτάνιο-αέρας
- Αέρας

- **Access to TPEQUIL, HPFLAME and UVFLAME Software**

Το λογισμικό αυτό συνοδεύει τη αναφορά [6] του Turns. Στα ακόλουθα σχήματα φαίνονται τα δεδομένα εισόδου που χρειάζονται στο πρόγραμμα για να υπολογίσει την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης του μεθανίου CH_4 (hp πρόβλημα) καθώς και η σύσταση και οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου που προκύπτει.



```
Access to TPEQUIL, HPFLAME and UVFLAME Software
File Edit
input.hp
Save Save & Run
Adiabatic Flame Calculation for Specified Fuel, Phi, P, & Reactant
Enthalpy Using Olikara & Borman Equilibrium Routines
Problem Title: USER SPECIFIES TITLE HERE
01 /CARBON ATOMS IN FUEL
04 /HYDROGEN ATOMS IN FUEL
00 /OXYGEN ATOMS IN FUEL
00 /NITROGEN ATOMS IN FUEL
1,1 /EQUIVALENCE RATIO
3800. /TEMPERATURE (K) (Initial Guess)
101325.0 /PRESSURE (Pa)
-74831.0 /ENTHALPY OF REACTANTS PER KMOL FUEL (kJ/kmol-fuel)
```

Σχήμα 2.4: Καθορισμός δεδομένων εισόδου για την καύση του μεθανίου (HPFLAME).

```

Access to TPEQUIL, HPFLAME and UVFLAME Software
File Edit
Data below are as read from the input file. Compare
with INPUT.HP. If they do not agree, your input
data have not been entered correctly.

CARBON ATOMS 1.0
HYDROGEN ATOMS 4.0
OXYGEN ATOMS -0
NITROGEN ATOMS -0
EQUIVALENCE RATIO 1.000
TEMPERATURE (K) guess 3800.0
PRESSURE (Pa) 101325.0
ENTHALPY OF REACTANTS (kJ/kmol fuel) -74831.0

FLAME TEMP. & COMBUSTION PRODUCTS PROPERTIES

Flame Temperature [K] = 2225.57
Mixture Enthalpy [J/kg] = -2573E+06
Mixture Specific Heat, Cp [J/kg-K] = 219119E+04
Specific Heat Ratio, Cp/Cv = 1.1743
Mixture Molecular Weight [kg/kmol] = 27.4305
Moles of Fuel per Mole of Products = 0.09431455

The mole fractions of the product species are:
H: -00038893 O: -00021441 N: -00000001
H2: -00361061 OH: -00285974 CO: -00888527
NO: -00198733 O2: -00462374 H2O: -18339415
CO2: -00542927 N2: -70060654

```

Σχήμα 2.5: Αποτελέσματα για την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης, τη σύσταση και τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου (HPFLAME).

Το λογισμικό μας δίνει τη δυνατότητα να επιλύσουμε τριών ειδών προβλήματα, hp, tp και uv, ανάλογα με τη θερμοδυναμική κατάσταση στην οποία θα περιέλθει χημική ισορροπία στο μείγμα των προϊόντων. Επίσης μπορούμε να μελετήσουμε την καύση οποιοδήποτε καυσίμου με μοριακό τύπο της μορφής $C_mH_nO_qN_r$ με αέρα ο οποίος έχει σύσταση 79% N_2 και 21% O_2 κατά moles. Δώδεκα είδη θεωρούνται ως πιθανά προϊόντα: H, O, N, H_2 , OH, CO, NO, O_2 , H_2O , CO_2 , N_2 και Ar εάν έχει συμπεριληφθεί στο οξειδωτικό.

Δύο από τα σημαντικότερα λογισμικά χημικής κινητικής παρατίθενται συνοπτικά στη συνέχεια:

- **CHEMKIN II**

Το CHEMKIN II είναι ένα πρόγραμμα χημικής κινητικής που αναπτύχθηκε από τη Sandia National Laboratories [12]. Το πακέτο του προγράμματος περιλαμβάνει:

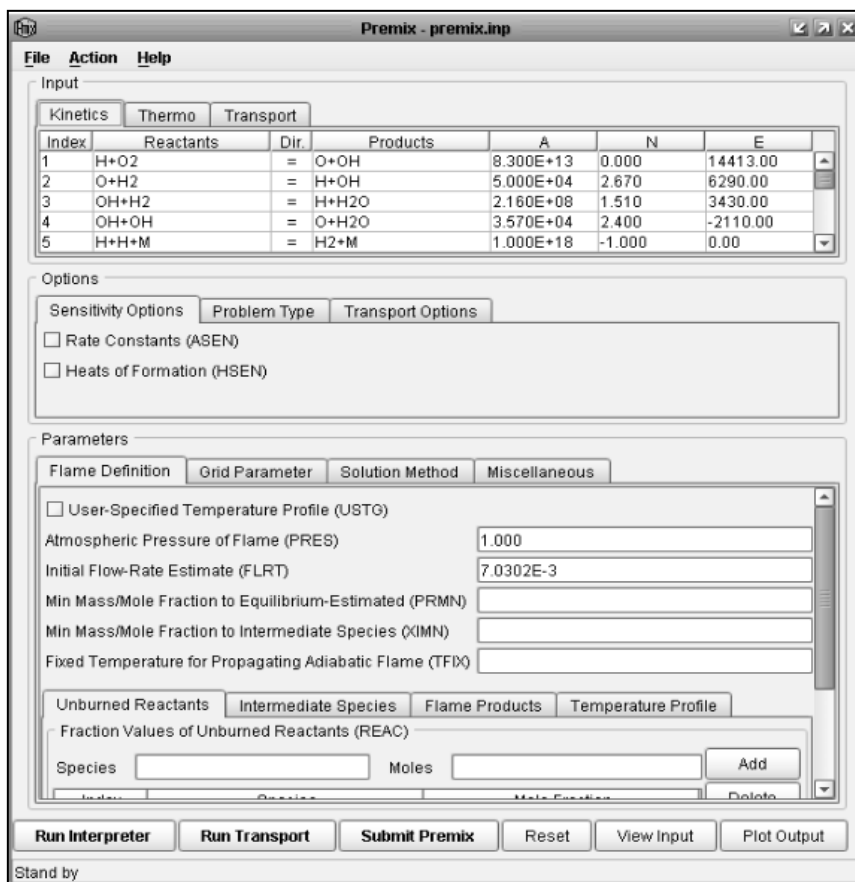
- τη βασική βιβλιοθήκη cklib η οποία περιέχει θερμοδυναμικά στοιχεία καθώς και ιδιότητες μεταφοράς θερμότητας για την αντίδραση ομογενών αερίων
- ένα κώδικα μηδενικής διάστασης για ανάλυση ευαισθησίας / προσομοίωση χημικής κινητικής
- ένα μονοδιάστατο κώδικα για στρωτή προαναμειγμένη φλόγα

- κώδικα χημικής ισορροπίας
- κώδικες για τυπικά μοντέλα αντιδραστήρων/ θαλάμων καύσης

Επίσης μέσω του μεταφραστή του προγράμματος δίνεται η δυνατότητα στο χρήστη να καθορίσει το μηχανισμό της αντίδρασης και να ορίσει τα είδη που θα ληφθούν υπόψη στους υπολογισμούς σαν πιθανά προϊόντα.

Το πρόγραμμα διαρκώς βελτιώνεται και γι' αυτό πρόσφατα έχουν βγει στην αγορά καινούριες εκδόσεις όπως το CHEMKIN 4.1 που παρέχει στο χρήστη περισσότερα μοντέλα θαλάμων καύσης και ταχύτερη σύγκλιση καθώς και το CHEMKIN CFD το οποίο προσφέρεται με το λογισμικό υπολογιστικής ρευστομηχανικής ANSYS FLUENT για ακριβείς τρισδιάστατους υπολογισμούς στο θάλαμο καύσης.

Στις αναφορές [12], [13] και [14] υπάρχουν περισσότερες πληροφορίες για το λογισμικό CHEMKIN και τις εκδόσεις του. Στο σχήμα που ακολουθεί φαίνεται ενδεικτικά το γραφικό περιβάλλον του CHEMKIN II.



Σχήμα 2.6: Το γραφικό περιβάλλον του CHEMKIN

- **Cantera**

Το Cantera είναι μια ανοικτή σουίτα [15] η οποία αποτελείται από διάφορα εργαλεία για επίλυση προβλημάτων χημικής κινητικής και προσδιορισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων και ιδιοτήτων μεταφοράς μάζας του καυσαερίου. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί με τη βοήθεια διαφόρων γλωσσών προγραμματισμού όπως είναι η Matlab ενώ πολύ σημαντική είναι η δυνατότητα που μας προσφέρει, μέσω ενός πυρήνα (kernel) γραμμένο σε γλώσσα C++, για διασύνδεση των επιμέρους συνιστωσών σε μια διάταξη για ακριβή μοντελοποίηση των διεργασιών του θαλάμου καύσης όπως η είσοδος του συμπιεσμένου αέρα, ο ψεκασμός καυσίμου, νερού, αέρα ψύξης κλπ.

Το πρόγραμμα παρέχει ένα εργαλείο για μείγματα που ονομάζεται GRI30 το οποίο αναπαριστά τον μηχανισμό αντιδράσεων του GRI-Mech 3.0. Περιλαμβάνει 53 είδη που αποτελούνται από τα στοιχεία H, C, O, N και Ar και 325 αντιδράσεις οι περισσότερες από τις οποίες είναι αντιστρέψιμες.

2.2.2 Λογισμικά προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων

Στο διαδίκτυο υπάρχουν πολλά διαθέσιμα προγράμματα μοντελοποίησης της λειτουργίας των αεριοστρόβιλων, ελεύθερα ή εμπορικά. Ενδεικτικά αναφέρονται:

- **PROOSIS** (PRopulsion Object Oriented SIMulation Software)

Για το PROOSIS θα γίνει εκτενής αναφορά στο 4ο κεφάλαιο όπου θα δούμε και τη διαδικασία με την οποία από το CEA παράγονται πίνακες με τις θερμοδυναμικές ιδιότητες και ιδιότητες μεταφοράς μάζας για το εργαζόμενο μέσο (αέρας και καυσαέρια) προκειμένου στη συνέχεια να γίνει από το πρόγραμμα η προσομοίωση της λειτουργίας του αεριοστρόβιλου.

- **GasTurb**

Το πακέτο GasTurb είναι από τα πιο διαδεδομένα εμπορικά προγράμματα ανάλυσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων μηδενικής διάστασης, δηλαδή οι επιμέρους συνιστώσες περιγράφονται με τη χρήση χαρακτηριστικών λειτουργίας. Το σημαντικό

του πλεονέκτημα όταν παρουσιάστηκε ήταν η ύπαρξη γραφικού περιβάλλοντος διασύνδεσης με τον χρήστη, το οποίο αποτέλεσε στη συνέχεια ένα από τα βασικότερα χαρακτηριστικά των προγραμμάτων μοντελοποίησης αεριοστρόβιλων. Το πρόγραμμα επιτρέπει την ανάλυση λειτουργίας μόνο προκαθορισμένων διατάξεων αεριοστρόβιλων και αεροπορικών κινητήρων [3].

Για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του καυσαερίου στο GasTurb χρησιμοποιούνται πίνακες που έχουν προκύψει από την καύση κάποιων καυσίμων στο λογισμικό CEA της NASA. Μέσω αυτών δίνεται η δυνατότητα στο χρήστη για μελέτη της επίδρασης διαφόρων καυσίμων στον κύκλο της μηχανής [16].

Στο επόμενο σχήμα φαίνονται τα δεδομένα που εισάγονται στο λογισμικό για το σημείο σχεδίασης ενός στροβιλοαντιδραστήρα απλού ρεύματος (turbojet).

Design Point Input for a Turbojet		
Fuel: Generic		
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> Turb Efficiency Tip Clear. Reheat Nozzle </div>		
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> Basic Data Air System Comp Efficiency Comp Design </div>		
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> Flight Ground </div>		
Altitude	m	0
Delta T from ISA	K	0
Relative Humidity [%]		0
Mach Number		0
Inlet Corr. Flow W2Rstd	kg/s	32
Intake Pressure Ratio		0.99
Pressure Ratio		12
Burner Exit Temperature	K	1450
Burner Design Efficiency		0.9999
Burner Partload Constant		1.6
Fuel Heating Value	MJ/kg	43.124
Overboard Bleed	kg/s	0
Power Offtake	kW	0
Mechanical Efficiency		0.9999
Burner Pressure Ratio		0.97
Turbine Exit Duct Press Ratio		0.98
Nozzle Thrust Coefficient		1
Design Nozzle Petal Angle [°]		20

Σχήμα 2.7: Εισαγωγή δεδομένων για το σημείο σχεδίασης ενός στροβιλοαντιδραστήρα απλού ρεύματος στο GasTurb.

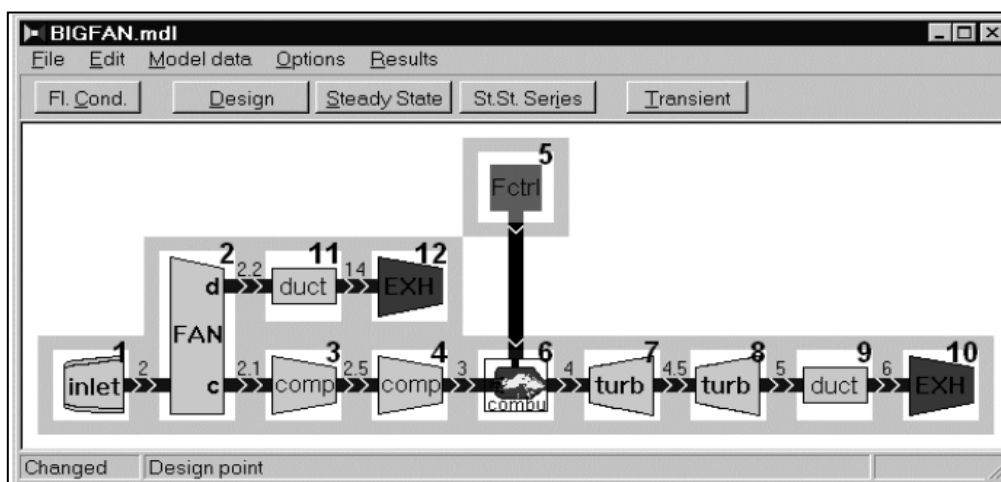
- **GSP**

Το εμπορικό πρόγραμμα GSP (Gas turbine Simulation Program) έχει βασική καινοτομία την ικανότητα καθορισμού από το χρήστη των ιδιοτήτων της κάθε συνιστώσας και στη συνέχεια τη διασύνδεση των επιμέρους συνιστωσών σε μια διάταξη (object oriented). Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατή η μελέτη διαφόρων διατάξεων κύκλου αεριοστρόβιλου χωρίς απαραίτητα να υπάρχουν στην αρχική βιβλιοθήκη του προγράμματος. Ο χρήστης εκτός του ότι μπορεί να συνδέσει συνιστώσες της αρεσκείας του μπορεί να τροποποιήσει τις υπάρχουσες συνιστώσες και να δημιουργήσει νέες [3].

Ως προ το μοντέλο της καύσης που ενσωματώνει, αυτό θα το χαρακτηρίζαμε «υβριδικό» καθώς χρησιμοποιεί [11]:

- Χημική ισορροπία για να υπολογίσει τη θερμοκρασία της καύσης καθώς και τη θερμότητα που εκλύεται κατά την καύση
- Συνδυασμό χημικής κινητικής (μονοδιάστατο μοντέλο) και εμπειρικών σχέσεων για να υπολογισθούν οι επιμέρους συστάσεις των κύριων ρυπαντών (NO_x, CO, UHC & Καπνός). Για τα υπόλοιπα συστατικά του καυσαερίου εφαρμόζεται χημική ισορροπία.

Το πρόγραμμα GSP χρησιμοποιεί ένα φιλικό προς το χρήστη γραφικό περιβάλλον. Στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται η μορφή που έχει στο πρόγραμμα ένας Στροβιλοαντιδραστήρας Διπλού Τυμπάνου Διπλού Ρεύματος.



Σχήμα 2.8: Συγκρότηση μοντέλου Στροβιλοαντιδραστήρα Διπλού τυμπάνου με το πρόγραμμα GSP.

2.3 Σύνοψη – Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάστηκαν οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση της καύσης στον υπολογιστή καθώς και τα διάφορα λογισμικά που κάνουν μοντελοποίηση της καύσης και προσομοίωση ολόκληρης της λειτουργίας της μηχανής.

Η παρουσίαση ξεκίνησε από το απλό μοντέλο της πλήρους καύσης που αγνοεί την επίδραση της χημικής διάστασης. Στη συνέχεια έγινε αναλυτική περιγραφή του πιο ακριβές μοντέλου της χημικής ισορροπίας με διάσταση των προϊόντων της καύσης και παρουσιάστηκε ένα τυπικό παράδειγμα για πληρέστερη κατανόηση του προβλήματος ενώ έγινε και μια αναφορά στις αρχές που διέπουν τη χημική κινητική.

Στην επόμενη ενότητα παρουσιάστηκαν διάφορα λογισμικά, ελεύθερα ή εμπορικά, τα οποία κάνουν μοντελοποίηση της καύσης στον υπολογιστή είτε με τη μέθοδο της χημικής ισορροπίας είτε με αυτή της χημικής κινητικής. Τέλος έγινε αναφορά σε κάποια πολύ κοινά λογισμικά προσομοίωσης της λειτουργίας των αεριοστρόβιλων που χρησιμοποιούνται ευρέως στην έρευνα και στη βιομηχανία.

3. Περιγραφή NASA CEA

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται εκτενώς το λογισμικό Chemical Equilibrium with Applications (CEA) της NASA το που είναι και το βασικό εργαλείο της παρούσας διπλωματικής. Αναλύονται οι δυνατότητές του και τα συγκριτικά του πλεονεκτήματα που το κάνουν να είναι το πιο διαδομένο εργαλείο για την μελέτη φαινομένων σύμφωνα με τη θεωρία της χημικής ισορροπίας. Παρουσιάζεται η βασική δομή του και ακολούθως γίνεται μια λεπτομερή ανάλυση για τη διαδικασία με την οποία δημιουργούμε το αρχείο εισόδου για το πρόγραμμα τόσο στην περίπτωση που το μείγμα των αντιδρώντων βρίσκεται στην βιβλιοθήκη του προγράμματος όσο και στην περίπτωση που κάποιο από τα αντιδρώντα (καύσιμο ή οξειδωτικό) δεν βρίσκεται σ' αυτή. Τέλος παρουσιάζονται υπολογιστικοί κώδικες που δημιουργήθηκαν για την τελευταία περίπτωση και γίνεται με το CEA μια μελέτη για την επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου.

3.1 Χαρακτηριστικά και δυνατότητες NASA CEA

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται μερικά από τα χαρακτηριστικά που κάνουν το λογισμικό CEA της NASA να ξεχωρίζει και να είναι το ευρύτερα χρησιμοποιούμενο λογισμικό χημικής ισορροπίας.

Η εκτενής βιβλιοθήκη του περιλαμβάνει δεδομένα για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων 1400 χημικών ενώσεων, ιόντων και χημικών στοιχείων από τα οποία:

- 60 είναι μόνο αντιδρώντα δηλαδή οξειδωτικά (π.χ. αέρας) και καύσιμα (π.χ. Jet-A, JP-4), υγρής [L], αέριας [g] ή στερεάς [s] φάσης. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω είδη αντιδρώντων και καθορίζοντας τις σχετικές αναλογίες τους μπορούμε να παράγουμε σχεδόν οποιαδήποτε μείγμα οξειδωτικού ή οποιαδήποτε μείγμα καυσίμου.

Εναλλακτικά μπορεί ο χρήστης να καθορίσει από μόνος του κάποιο από τα αντιδρώντα ή ακόμα και ολόκληρο το μείγμα των αντιδρώντων. Τα

παραπάνω θα αναλυθούν σε επόμενη ενότητα που εξετάζεται το πώς δημιουργείται το αρχείο εισόδου του προγράμματος.

- 1340 είναι προϊόντα καύσης (σ' αυτά συμπεριλαμβάνονται και ενώσεις ή στοιχεία που μπορεί να υπάρξουν και ως αντιδρώντα και ως προϊόντα), αέρια φάσης ή συμπυκνωμένα.

Στο παράρτημα Π-1 δίνονται αναλυτικά, κατά σειρά, τα ονόματα των προϊόντων αέριας φάσης, των προϊόντων συμπυκνωμένης φάσης καθώς και των αντιδρώντων που βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη (αρχείο thermo.lib) του NASA CEA.

Λόγου του τεράστιου αυτού αριθμού για αναζήτηση προϊόντων το πρόγραμμα μας δίνει τη δυνατότητα, μέσω του φιλικού περιβάλλοντος δημιουργίας του αρχείου εισόδου, να του ζητήσουμε στους υπολογισμούς να μη λάβει καθόλου υπόψη (omit) κάποια από τα παραπάνω ως πιθανά προϊόντα ή αντίθετα να επικεντρωθεί (only) σε ορισμένα μόνο από αυτά κατά τη χημική ισορροπία, τα οποία θα του καθορίσει ο χρήστης.

Το CEA επίσης μπορεί να κάνει υπολογισμούς για ρευστοδυναμικά μεγέθη όπως είναι η συνεκτικότητα, η θερμική συναγωγιμότητα και ο αριθμός Prandtl. Εκτός από την βιβλιοθήκη με τις θερμοδυναμικές ιδιότητες το CEA συνεργάζεται και με άλλη μια που περιέχει απαραίτητα στοιχεία για τον υπολογισμό των μεγεθών μεταφοράς θερμότητας για 65 αέρια προϊόντα της καύσης και 42 αλληλεπιδράσεις ζευγών π.χ. $\text{CO}_2 + \text{N}_2$, $\text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ κλπ.

Επιπλέον το πρόγραμμα μας παρέχει τη δυνατότητα για μελέτη του προβλήματος της χημικής ισορροπίας για διάφορες θερμοδυναμικές καταστάσεις των προϊόντων της καύσης π.χ. για συγκεκριμένη ενθαλπία και πίεση (πρόβλημα hp), για συγκεκριμένη πίεση και θερμοκρασία (πρόβλημα tp) κλπ. Επίσης μπορούμε να κάνουμε παραμετρική μελέτη της καύσης για διάφορους λόγους καυσίμου-οξειδωτικού (FAR), για διάφορες πιέσεις και θερμοκρασίες των προϊόντων της καύσης.

Τέλος στα χαρακτηριστικά του CEA θα πρέπει να αναφερθεί η πολύ γρήγορη σύγκλιση που φτάνει τις 8-20 επαναλήψεις για το πρώτο σημείο (για το οποίο γίνονται αυθαίρετες αρχικές εκτιμήσεις) και 3-10 επαναλήψεις για τα επόμενα σημεία (που χρησιμοποιούν για αρχικές εκτιμήσεις δεδομένα των προηγούμενων σημείων).

Κάθε σημείο ισοδυναμεί με την επίτευξη της χημικής ισορροπίας σε μια συγκεκριμένη θερμοδυναμική κατάσταση π.χ. πρόβλημα tp σε μια συγκεκριμένη πίεση και θερμοκρασία.

3.2 Δομή του NASA CEA

Τη βασική δομή του NASA CEA απαρτίζουν τα εξής αρχεία:

- Η εφαρμογή CEA_GUI για τη δημιουργία του αρχείου εισόδου
- Ο πηγαίος κώδικας cea2.for
- Οι βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib

Ακολουθεί μια σύντομη περιγραφή για καθένα από τα παραπάνω.

Η δημιουργία του αρχείου εισόδου γίνεται με την εφαρμογή CEA_GUI (Graphical User Interface) η οποία έχει αναπτυχθεί σε γραφικό περιβάλλον Java και είναι πολύ εύκολη και λειτουργική στην επικοινωνία της με το χρήστη. Στο κομμάτι της δημιουργίας του αρχείου εισόδου θα επεκταθούμε στην επόμενη ενότητα του κεφαλαίου.

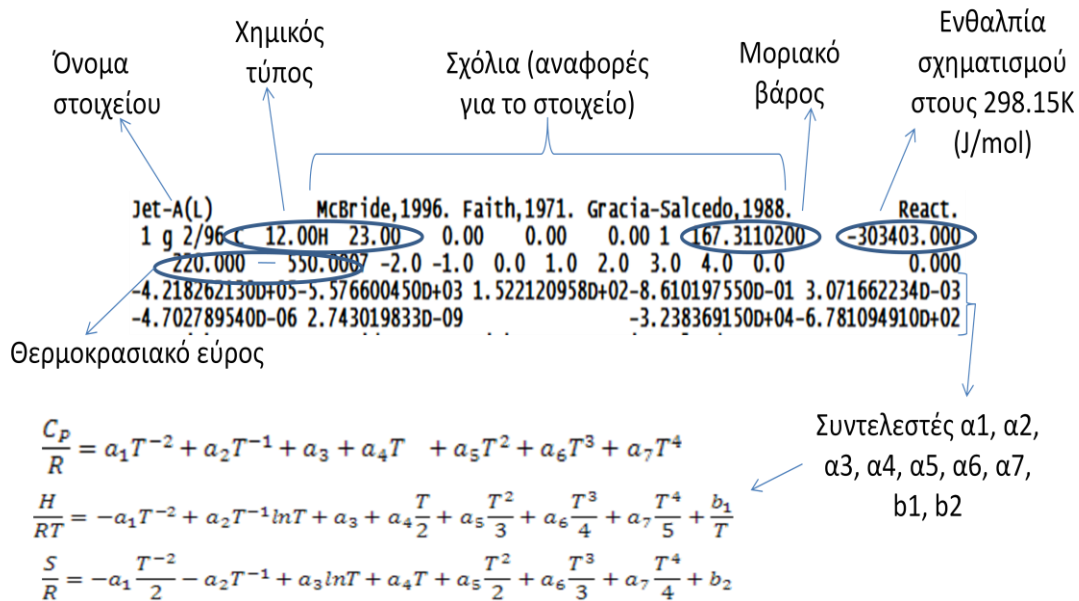
Ο πηγαίος κώδικας είναι ο υπολογιστικός κώδικας cea2.for γραμμένος σε ANSI Fortran 77, αποτελείται από περίπου 6300 γραμμές και χρησιμοποιεί 225 Kb μνήμης. Περιέχει όλες τις απαραίτητες εντολές και υπορουτίνες που εκτός όλων των άλλων είναι υπεύθυνες για:

- την επεξεργασία του αρχείου εισόδου
- τη συνεργασία με τις βιβλιοθήκες που αναλύονται παρακάτω και την ανάκτηση δεδομένων από αυτές για τα χημικά στοιχεία, ιόντα ή ενώσεις του εκάστοτε προβλήματος
- την επίλυση της χημικής ισορροπίας για τη δεδομένη θερμοδυναμική κατάσταση του προβλήματος με τη μέθοδο Newton-Raphson
- την παρουσίαση των αποτελεσμάτων

Οι υπορουτίνες του προγράμματος αναλύονται εκτενώς στο παράρτημα Π-2.

Όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη ενότητα υπάρχουν δύο βιβλιοθήκες.

Η πρώτη είναι το αρχείο thermo.inp (ή thermo.lib μετά την πρώτη επεξεργασία του) το οποίο περιέχει όλα τα απαραίτητα δεδομένα για τους θερμοδυναμικούς υπολογισμούς των 60 αντιδρώντων (οξειδωτικών και καυσίμων) και των 1340 προϊόντων (αέριος ή συμπυκνωμένης φάσης) που είναι τυποποιημένα στο NASA CEA. Ενδεικτικά αναφέρονται τα στοιχεία που υπάρχουν για το αντιδρών Jet-A(L):



Σχήμα 3.1: Στοιχεία για το Jet-A(L) από τη βιβλιοθήκη θερμοδυναμικών ιδιοτήτων thermo.lib του NASA CEA.

Οι μοριακές θερμοδυναμικές ιδιότητες ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, ενθαλπία και εντροπία είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας (σε πίεση αναφοράς $P_{ref} = 1\text{bar}$) καθώς γίνεται η υπόθεση των ιδανικών αερίων** και δίνονται υπό τη μορφή συντελεστών ελαχίστων τετραγώνων για καθένα στοιχείο i . Η φόρμα αυτή περιλαμβάνει επτά όρους για το C_p/R και αντίστοιχους συντελεστές για την ενθαλπία και την εντροπία καθώς και τις σταθερές της ολοκλήρωσης b_1 και b_2 . Οι σχέσεις αυτές παρατίθενται και κάτωθι για λόγους ευκρίνειας και ακριβέστερης έκφρασης:

$$\frac{\overline{C_{p,i}}}{R} = \alpha_1 T^{-2} + \alpha_2 T^{-1} + \alpha_3 + \alpha_4 T + \alpha_5 T^2 + \alpha_6 T^3 + \alpha_7 T^4 \quad (3.1)$$

$$\frac{\overline{h_i}}{RT} = -\alpha_1 T^{-2} + \alpha_2 T^{-1} \ln T + \alpha_3 + \alpha_4 \frac{T}{2} + \alpha_5 \frac{T^2}{3} + \alpha_6 \frac{T^3}{4} + \alpha_7 \frac{T^4}{5} + \frac{b_1}{T} \quad (3.2)$$

$$\frac{\overline{s_i}}{RT} = -\alpha_1 \frac{T^{-2}}{2} - \alpha_2 T^{-1} + \alpha_3 \ln T + \alpha_4 T + \alpha_5 \frac{T^2}{2} + \alpha_6 \frac{T^3}{3} + \alpha_7 \frac{T^4}{4} + b_2 \quad (3.3)$$

Υπολογίζοντας επομένως τις θερμοδυναμικές ιδιότητες της κάθε συνιστώσας του καυσαερίου από τις παραπάνω σχέσεις και την αναλογία της καθεμιάς στο συνολικό μείγμα (x_i ή Y_i) με τον κώδικα `cea2.for` που κάνει εφαρμογή της χημικής ισορροπίας μπορούμε να υπολογίσουμε τις θερμοδυναμικές ιδιότητες ολόκληρου του καυσαερίου από σχέσεις της μορφής (2.23) – (2.26).

Η δεύτερη βιβλιοθήκη είναι το αρχείο `trans.inp` (ή `trans.lib` μετά την πρώτη επεξεργασία του) το οποίο περιέχει απαραίτητα δεδομένα για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας των διαφόρων στοιχείων. Τα δεδομένα αυτά είναι διαθέσιμα για 65 αέρια προϊόντα της καύσης και 42 αλληλεπιδράσεις ζευγών και υπολογίζονται με παρόμοιο τρόπο όπως και στη βιβλιοθήκη με τις θερμοδυναμικές ιδιότητες. Για περισσότερες πληροφορίες παραπέμπουμε στα εγχειρίδια χρήσης του προγράμματος [7] & [17].

** Μια ακόμα παραδοχή που κάνει το NASA CEA είναι η απόρριψη συνύρπαξης δύο φάσεων σ' ένα χημικό στοιχείο ή σε μια χημική ένωση.

3.3 Χρήση NASA CEA

Στην ενότητα αυτή θα κάνουμε μια βήμα προς βήμα ανάλυση για τη χρήση του λογισμικού CEA σε δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη περίπτωση το μείγμα των αντιδρώντων (οξειδωτικό και καύσιμο) βρίσκεται στη βιβλιοθήκη `thermo.lib` ενώ στην άλλη περίπτωση έστω και ένα από τα συστατικά του μείγματος δεν βρίσκεται σ' αυτή και καθορίζεται από το χρήστη. Παράλληλα μ' αυτό γίνεται και μια ανάλυση στις δυνατότητες του λογισμικού.

3.3.1 Για μείγμα αντιδρώντων που όλα τα αντιδρώντα βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA

Τα καύσιμα και τα οξειδωτικά που βρίσκονται στη βιβλιοθήκη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του NASA CEA φαίνονται αναλυτικά στο παράρτημα Π1. Ενδεικτικά εδώ αναφέρουμε ορισμένα από τα πιο κοινά καύσιμα:

- Jet-A(g), Jet-A(L) – Ευρέως χρησιμοποιούμενο καύσιμο στην πολιτική αεροπορία

- JP-4 – Καύσιμο που χρησιμοποιείται στην πολεμική αεροπορία των Η.Π.Α
- JP-5 - Καύσιμο που χρησιμοποιείται στο πολεμικό ναυτικό των Η.Π.Α
- JP-10(g), JP-10(L)
- C₈H₁₈ – Ισοοκτάνιο, Ατμοί βενζίνης
- CH₄(g), CH₄(L) - Το μεθάνιο αποτελεί το βασικό συστατικό του φυσικού αερίου και θεωρείται ένα από τα κύρια εναλλακτικά καύσιμα για μακροπρόθεσμη χρήση στους αεριοστρόβιλους.
- H₂(g), H₂(L) – Θεωρείται το καύσιμο του μέλλοντος για τους αεριοστρόβιλους λόγω της υψηλής θερμογόνου δύναμής του και των μηδενικών εκπομπών του σε άνθρακα. Ωστόσο συναντά ιδιαίτερες δυσκολίες στην αποθήκευση και στη μεταφορά του, απαιτεί ακριβές εγκαταστάσεις και γι' αυτό προς το παρόν η χρήση του είναι περιορισμένη.

Ο ατμοσφαιρικός αέρας (το βασικότερο οξειδωτικό) στο NASA CEA είναι ξηρός και έχει τη σύσταση που φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα:

Constituent	Chemical Formula	Mole Fraction y_i	Mass Fraction x_i
Nitrogen	N ₂	0.780840	0.755184
Oxygen	O ₂	0.209476	0.231416
Argon	Ar	0.009365	0.012916
Carbon Dioxide	CO ₂	0.000319	0.000484

Σχήμα 3.2: Σύσταση αέρα κατά moles και κατά μάζα στο NASA CEA

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τα βήματα που ακολουθούνται για τη δημιουργία του αρχείου εισόδου [(όνομα αρχείου).inp] για το πρόγραμμα με εφαρμογή τη μελέτη της αδιαβατικής καύσης του Jet-A(L) με ξηρό αέρα (σχήμα 3.2) στα 10 bar για διάφορους λόγους ισοδυναμίας καυσίμου $\Phi = 0.4 \div 1.6$ με βήμα 0.2, για πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης, ενώ θα ζητήσουμε από το πρόγραμμα να μας τυπώσει τα αποτελέσματα σε αρχεία plt προκειμένου να κάνουμε τις γραφικές παραστάσεις T (θερμοκρασία καύσης) – Φ και Σύσταση καυσαερίου – Φ .

1. Καρτέλα Problem (σχήμα 3.3)

- Μπορούμε προαιρετικά να βάλουμε κάποιο όνομα στην εφαρμογή (case) που μελετάμε. Το όνομα αυτό πρέπει απαραίτητα να ξεκινάει με κάποιο γράμμα της αλφαβήτου (μικρό ή κεφαλαίο).
- Τσεκάρουμε αν θέλουμε την επιλογή **Include ions** στην περίπτωση που επιθυμούμε στο πρόβλημα να ληφθούν υπόψη τα ιόντα σαν πιθανά προϊόντα της καύσης. Στη συγκεκριμένη εφαρμογή και γενικά στις συνήθειες περιπτώσεις καύσεως στους αεριοστρόβιλους αγνοούμε την επιλογή αυτή καθώς ιόντα εμφανίζονται σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες (6000K) όπως συμβαίνει στους πυραύλους.
- Καθορισμός του τύπου του προβλήματος που θέλουμε να επιλύσουμε ανάλογα τη θερμοδυναμική κατάσταση υπό την οποία θέλουμε να επέλθει χημική ισορροπία στο σύστημα. Όπως είναι γνωστό η θερμοδυναμική κατάσταση ενός συστήματος καθορίζεται πλήρως από τον καθορισμό δύο θερμοδυναμικών μεγεθών.

Με πιο απλά λόγια θα μπορούσαμε να πούμε ότι ανάλογα με το ποια δύο θερμοδυναμικά μεγέθη γνωρίζουμε (ή θέλουμε να έχει) για το μείγμα των προϊόντων της καύσης επιλέγουμε και το ανάλογο πρόβλημα. Μερικές χαρακτηριστικές επιλογές είναι:

- Πρόβλημα tp – Θέλουμε να επιτευχθεί χημική ισορροπία σε συγκεκριμένη θερμοκρασία και πίεση. Η επιλογή αυτή θα χρησιμοποιηθεί στο επόμενο κεφάλαιο και είναι πολύ χρήσιμη για τη δημιουργία πινάκων που περιέχουν τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου.
- Πρόβλημα hp – Θέλουμε να επιτευχθεί χημική ισορροπία σε συγκεκριμένη ενθαλπία και πίεση των προϊόντων της καύσης. Ουσιαστικά με αυτή την επιλογή μελετάμε την ισοβαρή αδιαβατική καύση στους αεριοστρόβιλους καθώς η ενθαλπία του μείγματος των αντιδρώντων είναι ίση με την ενθαλπία του μείγματος των προϊόντων. Επομένως αν καθορίσουμε την ενθαλπία των αντιδρώντων και την πίεση της καύσης το πρόβλημα είναι καθορισμένο. Στην περίπτωση

που το μείγμα καυσίμου-οξειδωτικού είναι στη βιβλιοθήκη thermo.lib αυτό δεν είναι απαραίτητο, όπως θα δούμε παρακάτω, αφού η ενθαλπία υπολογίζεται με τη βοήθεια των συντελεστών που είδαμε στην προηγούμενη ενότητα.

- Πρόβλημα un - Θέλουμε να επιτευχθεί χημική ισορροπία σε συγκεκριμένη εσωτερική ενέργεια και όγκο των προϊόντων της καύσης. Ουσιαστικά πρόκειται για ισόχωρη αδιαβατική καύση, η οποία συμβαίνει στις εμβολοφόρες μηχανές εσωτερικής καύσεως, καθώς η εσωτερική ενέργεια του μείγματος των αντιδρώντων είναι ίση με την εσωτερική ενέργεια του μείγματος των προϊόντων.
- Πρόβλημα sp – Θέλουμε να επιτευχθεί χημική ισορροπία σε συγκεκριμένη εντροπία και πίεση. Ουσιαστικά πρόκειται για την ισεντροπική (ιδανική χωρίς απώλειες) μεταβολή σε σταθερή πίεση.

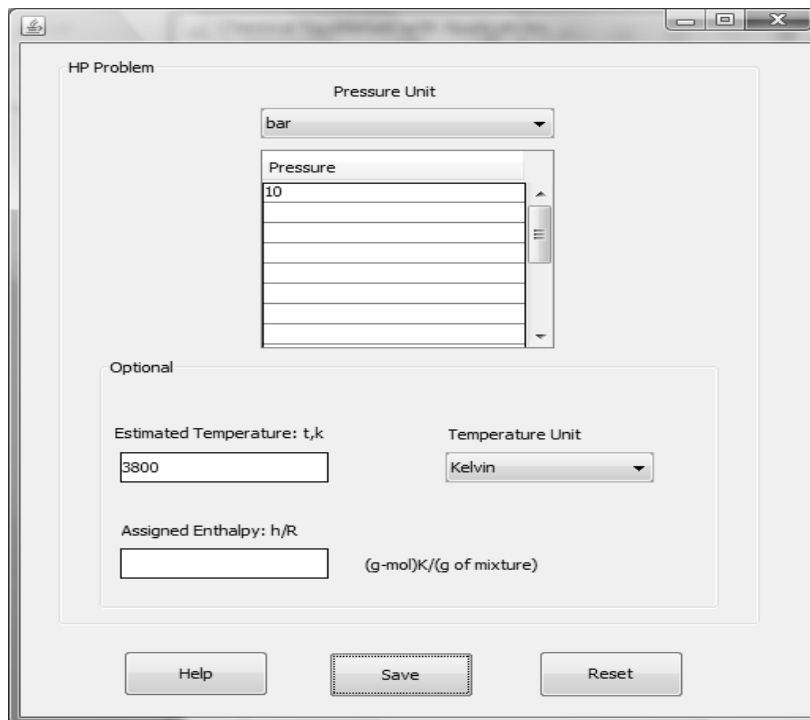
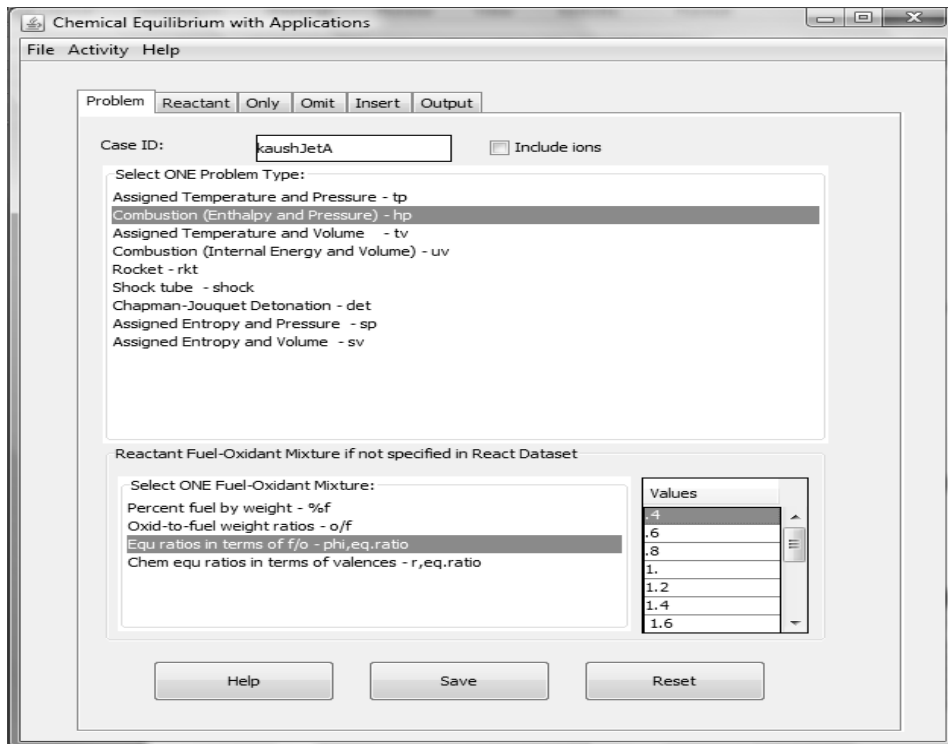
Στην εφαρμογή μας επειδή θέλουμε να μελετήσουμε την αδιαβατική καύση του Jet-A(L) επιλέγουμε το **πρόβλημα hp** και στην υποκαρτέλα που αναπτύσσεται επιλέγουμε την πίεση ίση με **10 bar** (εάν θέλουμε μπορούμε να επιλύσουμε το πρόβλημα και για άλλες πιέσεις π.χ. για P=1, 5, 50, 100bar,...). Επίσης εισάγουμε σαν όνομα της μελέτης μας **kaushJetA**.

Προαιρετικά μπορούμε να εισάγουμε την ενθαλπία του μείγματος των αντιδρώντων. Κάτι τέτοιο όμως σπάνια γίνεται γιατί γενικά είναι δύσκολη η γνώση αυτού του μεγέθους ενώ στη συγκεκριμένη περίπτωση τόσο το καύσιμο όσο και το οξειδωτικό είναι στη βιβλιοθήκη του CEA. Επίσης προαιρετικά μπορούμε να δώσουμε μια εκτίμηση για τη θερμοκρασία των προϊόντων της καύσης.

- Εισαγωγή της αναλογίας οξειδωτικού-καυσίμου στο μείγμα των αντιδρώντων σε μία από τις παρακάτω μορφές:
 - κατά βάρος περιεκτικότητα αντιδρώντων σε καύσιμο [%f]
 - λόγος μαζών οξειδωτικού-καυσίμου [o/f]
 - λόγος ισοδυναμίας καυσίμου Φ ο οποίος ορίζεται από τη σχέση:

$$\Phi = \frac{FAR}{FAR_{stoic h}} \quad (3.4)$$

Στην εφαρμογή που μελετάμε επιλέγουμε τον λόγο ισοδυναμίας καυσίμου και βάζουμε τις τιμές $\Phi = 0.4, 0.6, 0.8, 1., 1.2, 1.4, 1.6$.



Σχήμα 3.3: Καρτέλα Problem στο NASA CEA για τον καθορισμό του τύπου του προβλήματος και του λόγου καυσίμου-αέρα και υποκαρτέλα για τον καθορισμό της πίεσης και της ενθαλπίας (προαιρετικά) των προϊόντων της καύσης.

2. Καρτέλα Reactant (σχήμα 3.4)

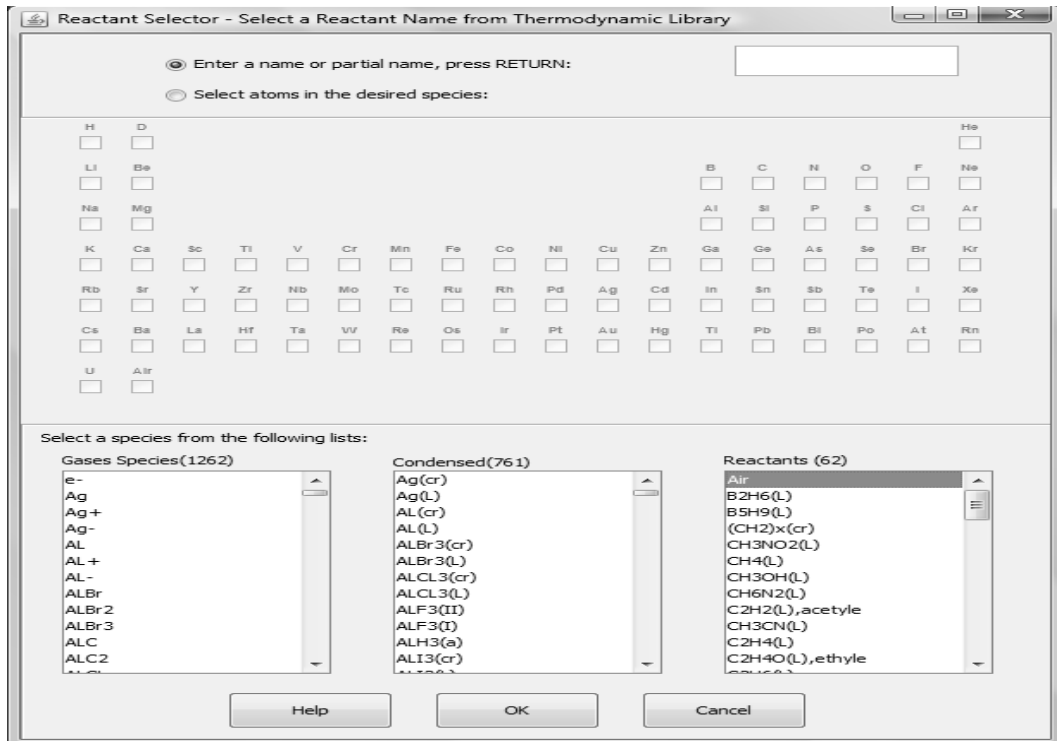
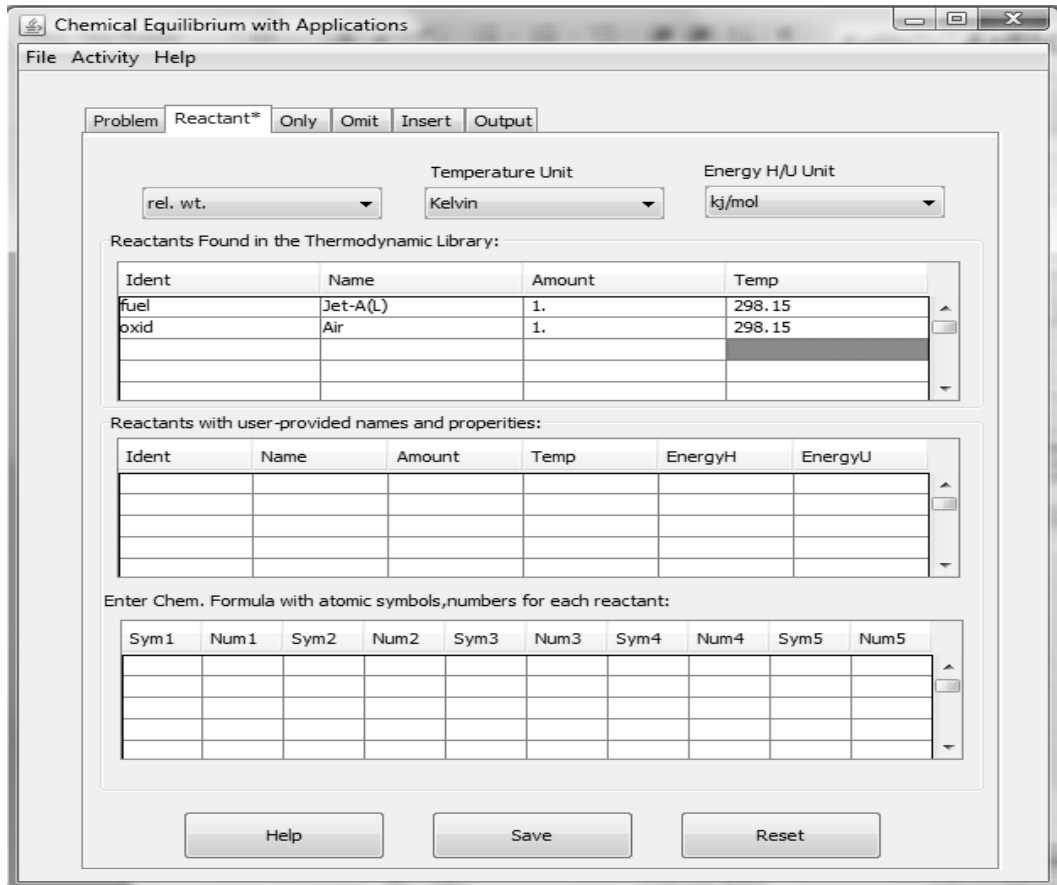
- Κατ' αρχήν καθορίζουμε τις μονάδες στις οποίες θα δώσουμε τα μεγέθη θερμοκρασία (συνήθως Kelvin) και ενθαλπία ή εσωτερική ενέργεια (συνήθως kJ/mol).

Επίσης επιλέγουμε τη μορφή με την οποία θα δώσουμε στο πρόγραμμα τη σχετική αναλογία των αντιδρώντων:

- Είτε με τις ποσότητες του καθενός σε moles
- Είτε με την κατά μάζα αναλογία του καθενός (rel. wt.). Με το δεύτερο αυτό πιο πρακτικό τρόπο οι τιμές που δίνονται για τα καύσιμα σχετίζονται με την κατά μάζα αναλογία τους στο ολικό καύσιμο (εάν έχουμε μείγμα από διάφορα καύσιμα) και αντίστοιχα οι τιμές που δίνονται για τα οξειδωτικά σχετίζονται με το ολικό οξειδωτικό (εάν έχουμε μείγμα από διάφορα οξειδωτικά). Η αναλογία του ολικού αντιδρώντος σε ολικό καύσιμο και ολικό οξειδωτικό καθορίζεται σ' αυτή την περίπτωση από το προηγούμενο βήμα (αναλογία οξειδωτικού-καυσίμου → Καρτέλα Problem).

Στο πρόβλημα μας επιλέγουμε κατά σειρά **rel. wt., Kelvin & kJ/mol**.

- Το επόμενο βήμα περιλαμβάνει:
 - Την επιλογή του είδους των αντιδρώντων (καύσιμο [fuel] ή οξειδωτικό [oxid] ή δεν ξέρουμε τι από τα δύο είναι [name]). Στην τελευταία περίπτωση θα πρέπει όλα τα αντιδρώντα να δοθούν με αυτή την ταυτότητα ενώ αντιμετωπίζονται σαν καύσιμα με $o/f = 0$.
 - Τον καθορισμό του ονόματος του κάθε αντιδρώντος, το οποίο το επιλέγουμε από την υποκαρτέλα που εμφανίζεται (σχήμα 3.4), στην περίπτωση βέβαια που το αντιδρών βρίσκεται στη βιβλιοθήκη thermo.lib του CEA (Reactants Found in the Thermodynamic Library). Στην αντίθετη περίπτωση (Reactants with user-provided names and properties) θα αναφερθούμε στην επόμενη ενότητα.



Σχήμα 3.4: Καρτέλα Reactant και υποκαρτέλα στο NASA CEA για τον καθορισμό των χαρακτηριστικών του μείγματος των αντιδρώντων (οξειδωτικού και καυσίμου).

- Τον καθορισμό της σχετικής κατά μάζας αναλογίας του καυσίμου ή του οξειδωτικού στο ολικό καύσιμο ή οξειδωτικό αντίστοιχα. Εναλλακτικά μπορούμε να εισάγουμε την ποσότητα του κάθε αντιδρώντος σε moles.
- Την εισαγωγή της θερμοκρασίας του κάθε αντιδρώντος καθώς με βάση τη θερμοκρασία αυτή θα υπολογισθούν από τη βιβλιοθήκη thermo.lib, όπως είδαμε στην ενότητα 3.2, οι θερμοδυναμικές του ιδιότητες ενώ έχοντας καθορίσει και τις αναλογίες του καθενός αντιδρώντος στο ολικό αντιδρών (κατά μάζα αναλογία καθενός στο ολικό καύσιμο ή οξειδωτικό → λόγος ισοδυναμίας ολικού καυσίμου στο ολικό αντιδρών) θα υπολογισθούν και οι ιδιότητες του ολικού αντιδρώντος.

Η εισαγωγή της θερμοκρασίας του αντιδρώντος είναι απαραίτητη μόνο σε προβλήματα καύσης hr και un προκειμένου να ανακτηθούν η ενθαλπία ή η εσωτερική ενέργεια των αντιδρώντων αντίστοιχα.

Στην εφαρμογή μας επειδή τόσο το **καύσιμο Jet-A(L)** όσο και το **οξειδωτικό, ο αέρας (Air)**, βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA απλά τα επιλέγουμε από την υποκαρτέλα και ορίζουμε τη θερμοκρασία τους στους **298.15K** (θερμοκρασία τυπικής ατμόσφαιρας). Επίσης επειδή έχουμε ένα μόνο οξειδωτικό και ένα καύσιμο **οι αντίστοιχες κατά μάζα αναλογίες τους λαμβάνονται ίσες με μονάδα** (σχήμα 3.4).

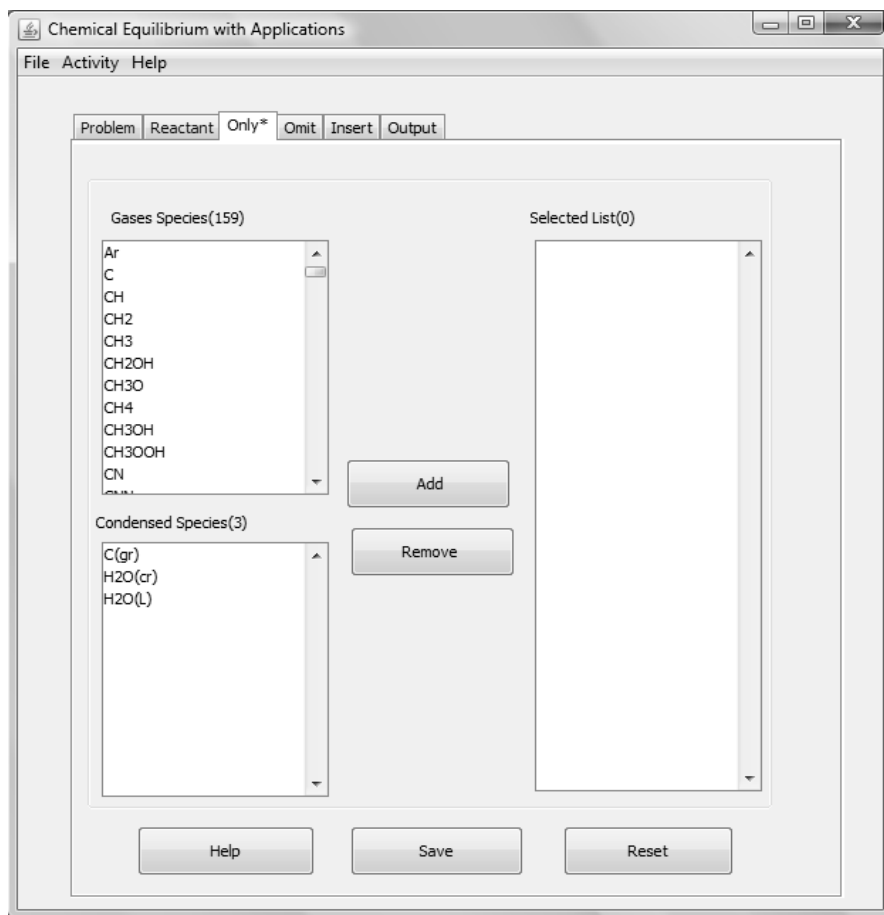
3. Καρτέλα Only (σχήμα 3.5)

Στη καρτέλα αυτή αποφασίζουμε εάν στους υπολογισμούς για τα προϊόντα της καύσης θέλουμε να ληφθούν υπόψη από το πρόγραμμα συγκεκριμένα μόνο στοιχεία ή ενώσεις ως πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία π.χ. στα μοντέλα που δεν λαμβάνεται υπόψη η χημική διάσταση (no dissociation models) καθορίζουμε ως προϊόντα της χημικής ισορροπίας μόνο τα Ar, CO₂, H₂O και N₂ (στοιχειομετρία) καθώς και το O₂ στην περίπτωση που έχουμε περίσσεια αέρα.

Επίσης η καρτέλα αυτή μας δίνει τη δυνατότητα να περιοριστούμε σε κάποια από τα προϊόντα της καύσης που μας ενδιαφέρουν ή που βρίσκονται σε μεγαλύτερες

ποσότητες από τ' άλλα και έτσι να βοηθήσουμε τον κώδικα να συγκλίνει πιο γρήγορα.

Στο πρόβλημα μας δεν περιοριζόμαστε σε κάποια στοιχεία και αφήνουμε το CEA να τα λάβει όλα υπόψη ως πιθανά προϊόντα (full dissociation). Επομένως η καρτέλα αυτή αφήνεται κενή.



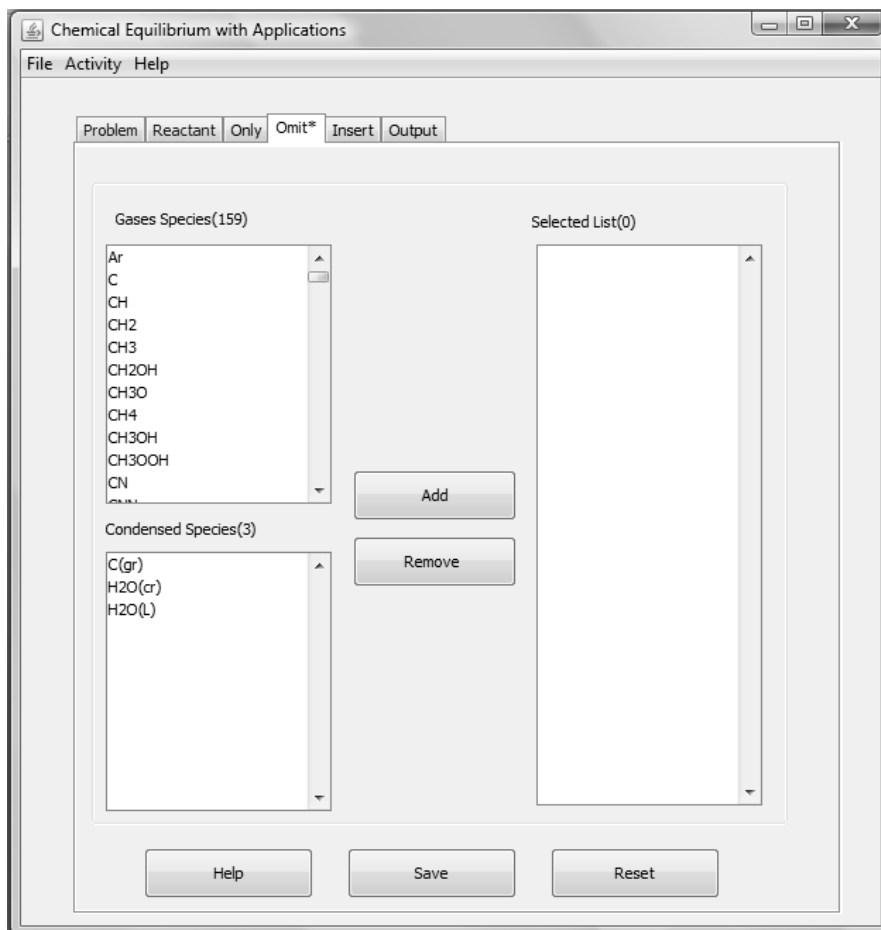
Σχήμα 3.5: Καρτέλα Only στο NASA CEA για σύγκλιση με ορισμένα μόνο προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία.

4. Καρτέλα Omit (σχήμα 3.6)

Η καρτέλα αυτή μας δίνει τη δυνατότητα, σε αντιδιαστολή με την προηγούμενη, να ζητήσουμε από το πρόγραμμα να παραλείψει κάποια στοιχεία ή ενώσεις ως πιθανά προϊόντα.

Κάτι τέτοιο είναι χρήσιμο σε περίπτωση που η παρουσία κάποιου από τα προϊόντα στο καυσαέριο δημιουργεί προβλήματα σύγκλισης στον κώδικα.

Όπως προαναφέρθηκε, στην εφαρμογή που μελετάμε αφήνουμε το CEA να λάβει υπόψη όλα τα στοιχεία ως πιθανά προϊόντα και έτσι και η καρτέλα αυτή αφήνεται κενή.

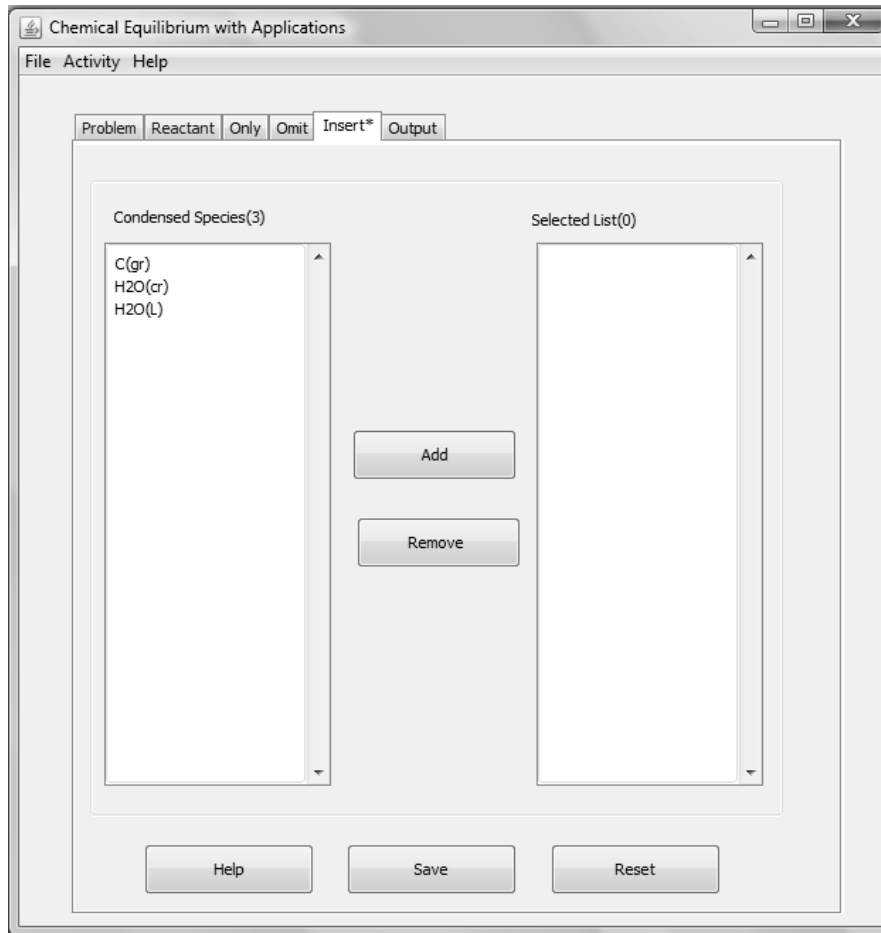


Σχήμα 3.6: Καρτέλα Omit στο NASA CEA για παράλειψη κάποιων προϊόντων κατά τη σύγκλιση του κώδικα κατά τη χημική ισορροπία.

5. Καρτέλα Insert (σχήμα 3.7)

Στη καρτέλα αυτή δίνουμε εντολή στο πρόγραμμα να δοκιμάσει, από την αρχή των επαναλήψεων για κάθε σημείο, κάποια συμπυκνωμένα προϊόντα (π.χ. νερό) που μπορεί ν' αποτελέσουν προϊόντα της καύσης. Αυτό συνήθως βοηθάει τον κώδικα του προγράμματος ώστε να συγκλίνει πιο γρήγορα εάν βέβαια γνωρίζουμε με αρκετή σιγουριά την ύπαρξη του συμπυκνώματος αυτού στο τελικό καυσαέριο.

Στο παράδειγμα της ενότητας αυτής και αυτή η καρτέλα αφήνεται όπως είναι χωρίς να κάνουμε κάποια ενέργεια.



Σχήμα 3.7: Καρτέλα Insert στο NASA CEA για να την εξαρχής λήψη συμπυκνωμάτων στους υπολογισμούς χημικής ισορροπίας ως πιθανά προϊόντα.

6. Καρτέλα Output (σχήμα 3.8)

Τέλος στην καρτέλα output καθορίζουμε διάφορες παραμέτρους για το αρχείο με τα τελικά αποτελέσματα [(όνομα αρχείου).out] όπως:

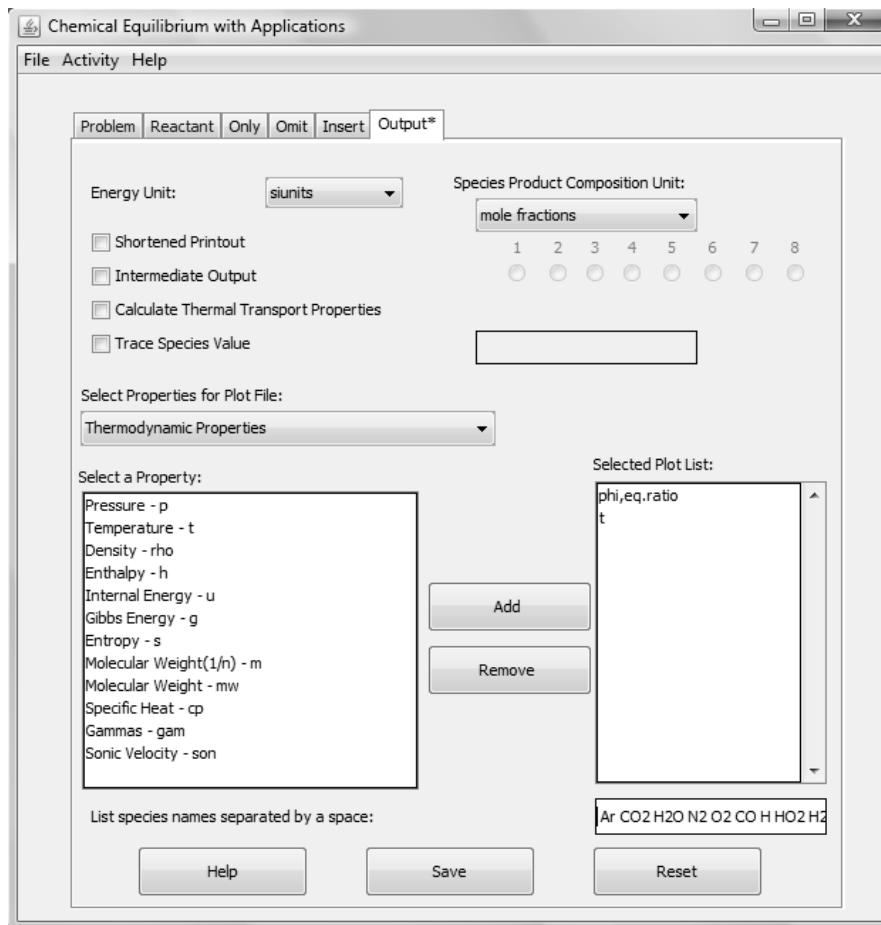
- Σε τι μονάδα θα υπολογισθεί η ενέργεια, δηλαδή joules [siunits] ή calories. Αφήνουμε την επιλογή **siunits**.
- Σε τι μορφή θα παρουσιαστούν τα προϊόντα της καύσης στο καυσαέριο όπου έχουμε τις επιλογές αναλογία mole [mole fractions] ή αναλογία μαζών [mass fractions]. Επιλέγουμε **mole fractions**.
- Εάν θέλουμε το αρχείο των αποτελεσμάτων να περιέχει συμπυγμένες πληροφορίες (shortened printout) δηλαδή να έχει μόνο τα δεδομένα του αρχείου εισόδου, μηνύματα λαθών και τα τελικά αποτελέσματα για τη

σύσταση και τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου. Άλλες πληροφορίες όπως τα είδη που λαμβάνονται υπόψη ως πιθανά προϊόντα καθώς και συμπληρωματικές πληροφορίες για τα αντιδρώντα (π.χ. μοριακός τύπος) αποκρύπτονται.

- Εάν θέλουμε στο αρχείο των αποτελεσμάτων να περιέχονται ενδιάμεσες πληροφορίες (intermediate output) που σχετίζονται με τη σύγκλιση του κώδικα της χημικής ισορροπίας. Στις στήλες που είναι δίπλα σ' αυτή την επιλογή μπορούμε να επιλέξουμε το σημείο για το οποίο θα εφαρμοστεί το παραπάνω.
- Εάν επιθυμούμε το λογισμικό να κάνει υπολογισμούς στα προϊόντα της καύσης και για μεγέθη που σχετίζονται με τη μεταφορά θερμότητας (calculate thermal transport properties).
- Το CEA από μόνο του τυπώνει στα τελικά αποτελέσματα μόνο τις συγκεντρώσεις των στοιχείων που η αναλογία τους σε mole στο καυσαέριο είναι μεγαλύτερη από 0.000005 ή $5 \cdot 10^{-6}$. Με την επιλογή trace species value και τον καθορισμό στο διπλανό κουτί της επιθυμητής τιμής μπορούμε να αλλάξουμε την παραπάνω τιμή αναφοράς.

Στις 4 τελευταίες επιλογές, στην εφαρμογή μας, δεν κάνουμε κάποια ενέργεια.

- Τέλος μπορούμε εάν θέλουμε να δημιουργήσουμε ένα αρχείο αποτελεσμάτων που μπορεί εύκολα να απεικονιστεί γραφικά [(όνομα αρχείου).plt] και περιέχει διάφορες πληροφορίες για κάθε σημείο όπως π.χ. τη θερμοκρασία των προϊόντων της καύσης, τον λόγο ισοδυναμίας καυσίμου Φ και τις συγκεντρώσεις των διαφόρων προϊόντων π.χ. H_2O , CO_2 , NO στο καυσαέριο. Αυτά τα μεγέθη ζητάμε από το πρόγραμμα να μας τυπώσει και για την εφαρμογή που μελετάμε.



Σχήμα 3.8: Καρτέλα Output στο NASA CEA για τον καθορισμό διαφόρων παραμέτρων του αρχείου αποτελεσμάτων (.out).

7. Εκτέλεση προγράμματος και αποτελέσματα

Αφού έχουμε ολοκληρώσει τα παραπάνω βήματα είμαστε έτοιμοι για να εκτελεστεί το πρόγραμμα. Πατάμε από τη γραμμή εργαλείων **Activity** και στη συνέχεια την επιλογή **Execute CEA2** (ή εναλλακτικά Ctrl+E). Το πρόγραμμα τότε μας ζητεί να εισάγουμε το όνομα που θέλουμε να δοθεί στο αρχείο εισόδου (kaush_JetA) και το οποίο έχει την κατάληξη inp. Δίνοντας το επιθυμητό όνομα αυτομάτως καθορίζεται και το όνομα στα αρχεία των τελικών αποτελεσμάτων (.out) και των αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση (.plt).

Εκτελείται το πρόγραμμα και μόλις συγκλίνει για όλα τα σημεία και τελειώσουν οι υπολογισμοί τότε μας παρουσιάζεται και το αρχείο των αποτελεσμάτων (.out) με τις θερμοδυναμικές ιδιότητες, τη σύσταση του καυσαερίου καθώς και τις ιδιότητες

μεταφοράς θερμότητας γι' αυτό σε περίπτωση που το έχουμε ζητήσει από το πρόγραμμα.

Ενδεικτικά φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα τα αρχεία εισόδου, αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση για την εφαρμογή που είδαμε παραπάνω.

```

kaush_JetA.inp - Notepad
File Edit Format View Help
problem case=kaushJetA phi,eq.ratio=.4,.6,.8,1.,1.2,1.4,1.6,
hp p,bar=10, t,k=3800
react
fuel=Jet-A(L) wt=1. t,k=298.15
oxid=Air wt=1. t,k=298.15
output
siunits
plot phi,eq.ratio t Ar CO2 H2O N2 O2 CO H HO2 H2 NO NO2 N2O O OH
end
    
```

Σχήμα 3.9: Αρχείο εισόδου στο NASA CEA [kaush_JetA.inp]

```

kaush_JetA.out - Notepad
File Edit Format View Help
THERMODYNAMIC EQUILIBRIUM COMBUSTION PROPERTIES AT ASSIGNED
PRESSURES
CASE = kaushJetA
REACTANT          WT FRACTION      ENERGY          TEMP
FUEL              Jet-A(L)         (SEE NOTE)      KJ/KG-MOL        K
OXIDANT           Air              1.0000000      -303403.000      298.150
                  1.0000000      -125.530        298.150
O/F= 18.33685 %FUEL= 5.171472 R,EQ. RATIO= 0.800304 PHI,EQ. RATIO= 0.800000
THERMODYNAMIC PROPERTIES
P, BAR            10.000
T, K              2054.85
RHO, KG/CU M     1.6949 0
H, KJ/KG         -97.890
U, KJ/KG         -687.91
G, KJ/KG         -17774.2
S, KJ/(KG)(K)   8.6022
M, (1/n)         28.957
(dLV/dLP)t      -1.00020
(dLV/dLT)p      1.0066
Cp, KJ/(KG)(K)  1.4842
GAMMAS          1.2435
SON VEL,M/SEC   856.6
MOLE FRACTIONS
*Ar              0.00888
*CO              0.00036
*CO2            0.10735
*H              0.00001
*H2             0.00007
H2O             0.10230
*NO             0.00364
NO2            0.00001
*N2            0.73842
*O              0.00006
*OH            0.00111
*O2            0.03779
* THERMODYNAMIC PROPERTIES FITTED TO 20000.K
    
```

Σχήμα 3.10: Αρχείο αποτελεσμάτων στο NASA CEA [kaush_JetA.out]

Για το καυσαέριο της χημικής ισορροπίας, όπως φαίνεται και από το παραπάνω αρχείο αποτελεσμάτων, υπολογίζονται μεταξύ άλλων τα εξής βασικά μεγέθη:

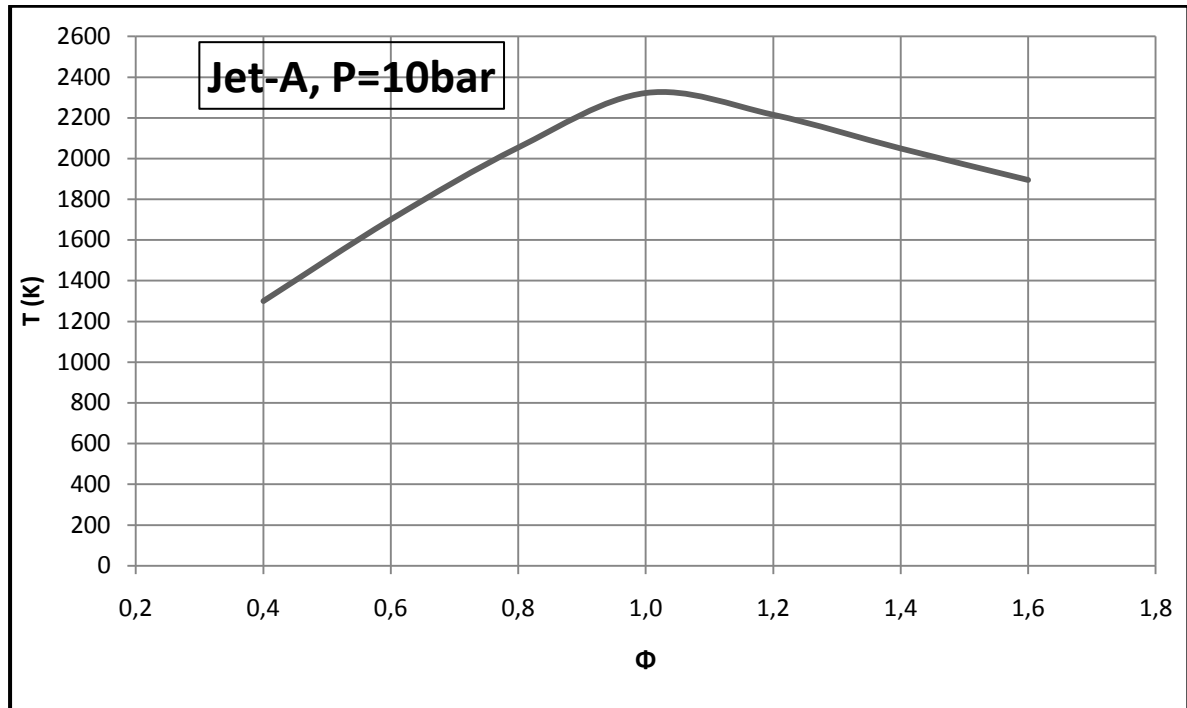
- **Θερμοδυναμικές ιδιότητες:** Πίεση [P], Θερμοκρασία [T], Πυκνότητα [RHO], Ενθαλπία [H], Εσωτερική ενέργεια [U], Ενέργεια Gibbs [G], Εντροπία [S], Μοριακό βάρος [M], Ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση [Cp], Ισεντροπικός εκθέτης [GAMMAS], Ταχύτητα του ήχου [SON VEL]
- **Σύσταση του καυσαερίου** κατά mole ή κατά μάζα ανάλογα με την επιλογή μας στην καρτέλα Output
- **Ιδιότητες μεταφοράς θερμότητας (προαιρετικά):** Συνεκτικότητα [VISC], Θερμική αγωγιμότητα [CONDUCTIVITY], Αριθμός Prandtl [PRANDTL NUMBER]

#	phi,eq.rat	Ar	CO2	H2O	N2	O2	CO
4.0000E-01	1.3000E+03	9.1175E-03	5.5461E-02	5.2850E-02	7.6006E-01	1.2221E-01	0.0000E+00
6.0000E-01	1.7009E+03	8.9982E-03	8.1943E-02	7.8156E-02	7.4938E-01	7.9584E-02	6.3663E-06
8.0000E-01	2.0549E+03	8.8781E-03	1.0735E-01	1.0230E-01	7.3842E-01	3.7795E-02	3.5993E-04
1.0000E+00	2.3226E+03	8.7192E-03	1.2343E-01	1.2375E-01	7.2596E-01	3.5772E-03	8.7173E-03
1.2000E+00	2.2156E+03	8.3340E-03	9.2329E-02	1.2912E-01	6.9483E-01	1.0887E-05	5.9188E-02
1.4000E+00	2.0501E+03	7.9438E-03	6.5961E-02	1.2144E-01	6.6234E-01	1.6335E-07	1.0249E-01
1.6000E+00	1.8951E+03	7.5873E-03	4.9437E-02	1.0666E-01	6.3262E-01	0.0000E+00	1.3440E-01

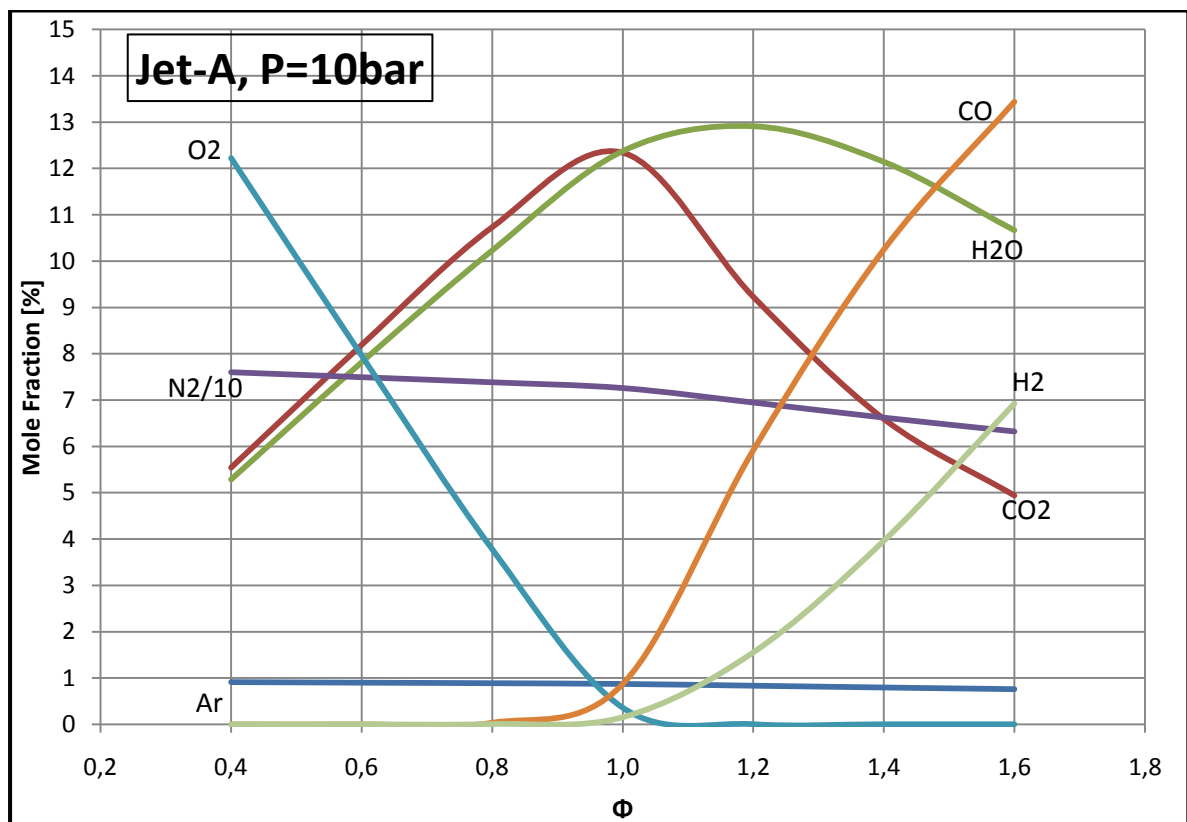
H	H2	NO	NO2	N2O	O	OH
0.0000E+00	3.4064E-08	0.0000E+00	2.9655E-04	7.8003E-06	6.1185E-08	1.9559E-08
6.2713E-08	5.4519E-07	1.7752E-06	1.7476E-03	1.0711E-05	3.1571E-07	4.0260E-06
6.2823E-06	1.8117E-06	7.1775E-05	3.6432E-03	7.7766E-06	6.2678E-07	6.1941E-05
1.3517E-04	8.3930E-07	1.5410E-03	2.0597E-03	9.3179E-07	3.4815E-07	1.0695E-04
2.4270E-04	0.0000E+00	1.5531E-02	8.8444E-05	0.0000E+00	1.4655E-08	3.1118E-06
1.4317E-04	0.0000E+00	3.9624E-02	7.0856E-06	0.0000E+00	0.0000E+00	1.2443E-07
6.3739E-05	0.0000E+00	6.9225E-02	6.7211E-07	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00

Σχήμα 3.11: Αρχείο αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση στο NASA CEA [kaush_JetA.plt]

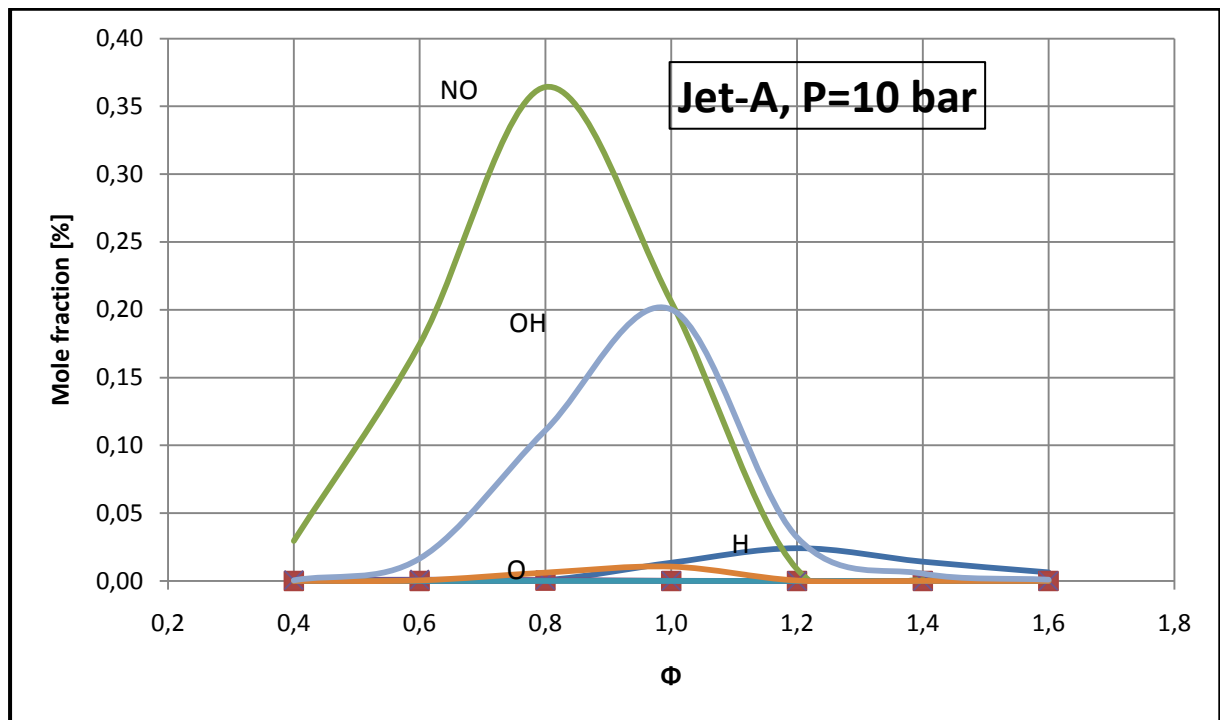
Από τα παραπάνω plt αρχεία μπορούμε εύκολα με τη βοήθεια του λογισμικού Microsoft Excel (ή του gnuplot) να κάνουμε τις ζητούμενες γραφικές παραστάσεις.



Σχήμα 3.12: Γραφική παράσταση αδιαβατικής θερμοκρασίας καύσης T - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για $P=10\text{bar}$.



Σχήμα 3.13: Γραφική παράσταση κατά mole σύστασης καυσαερίου - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για $P=10\text{bar}$ (μεγάλες συγκεντρώσεις).



Σχήμα 3.14: Γραφική παράσταση κατά mole σύστασης καυσαερίου - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου Φ για $P=10\text{bar}$ (μικρές συγκεντρώσεις).

Για ακόμα περισσότερες οδηγίες σχετικά με τη δημιουργία του αρχείου εισόδου για το πρόγραμμα καθώς και επιπλέον εφαρμογές παραπέμπουμε στο εγχειρίδιο του προγράμματος [17].

3.3.2 Για μείγμα αντιδρώντων που έστω και ένα από τα αντιδρώντα δεν βρίσκεται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA

Κάποιες φορές προκύπτει το πρόβλημα να θέλουμε να έχουμε για καύσιμο (ή και οξειδωτικό) κάποια χημική ένωση η οποία δεν βρίσκεται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA όπως π.χ. όταν θέλουμε να μελετήσουμε την καύση του Diesel(g) που έχει μοριακό τύπο $C_{12.9}H_{23.22}$. Σ' αυτή την περίπτωση η διαδικασία που ακολουθείται διαφέρει, όπως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα, στο βήμα καθορισμού του μείγματος των αντιδρώντων στη 2^η καρτέλα (Reactant) καθώς πρέπει να προσδιορίσουμε επιπλέον στο πρόγραμμα για το «άγνωστο» αντιδρών:

- Το όνομά του

- Τον μοριακό του τύπο (Enter Chem. Formula with atomic symbols, numbers for each reactant) καθώς και
- Την απόλυτή του ενθαλπία στην θερμοκρασία την οποία βρίσκεται, σε περίπτωση που έχουμε ένα hp πρόβλημα ή την εσωτερική του ενέργεια εάν έχουμε ένα un πρόβλημα. Μόνο έτσι θα μπορέσει να υπολογιστεί η ενθαλπία ή η εσωτερική ενέργεια του ολικού αντιδρώντος καθώς δεν υπάρχουν δεδομένα για το στοιχείο αυτό από τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη.

Ενδεικτικά φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα τα δεδομένα που εισάγουμε στην εφαρμογή CEA_GUI για τη δημιουργία του αρχείου εισόδου που μελετά την καύση του Jet-A με ξηρό αέρα σε περίπτωση που γι' αυτό δεν υπήρχαν δεδομένα στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA.

Chemical Equilibrium with Applications

File Activity Help

Problem Reactant* Only Omit Insert Output

rel. wt. Temperature Unit Kelvin Energy H/U Unit kJ/mol

Reactants Found in the Thermodynamic Library:

Ident	Name	Amount	Temp
oxid	Air	1.	298.15

Reactants with user-provided names and properties:

Ident	Name	Amount	Temp	EnergyH	EnergyU
fuel	JetA	1.	298.15	-303.403	

Enter Chem. Formula with atomic symbols, numbers for each reactant:

Sym1	Num1	Sym2	Num2	Sym3	Num3	Sym4	Num4	Sym5	Num5
C	12	H	23						

Help Save Reset

Σχήμα 3.15: Καθορισμός δεδομένων στο αρχείο εισόδου του NASA CEA για ένα αντιδρών το οποίο δε βρίσκεται στη θερμοδυναμική του βιβλιοθήκη.

Η ανάλυση που ακολουθεί υποθέτει ότι το άγνωστο αντιδρών είναι καύσιμο.

Το όνομα του αντιδρώντος μπορεί να καθορίζεται ελεύθερα από το χρήστη αρκεί ο πρώτος χαρακτήρας να είναι αλφαβητικός. Το όνομα μπορεί να περιέχει μέχρι 15 χαρακτήρες.

Για τον προσδιορισμό του μοριακού τύπου του αντιδρώντος υπάρχουν οι εξής περιπτώσεις:

- Να μας δίνεται ο μοριακός του τύπος στην μορφή $C_m H_n S_p O_q N_r$ οπότε δεν χρειάζονται επιπλέον υπολογισμοί ενώ μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε και το μοριακό βάρος του.
- Να μας δίνεται το μοριακό βάρος του καυσίμου, M_f , και η κατά μάζα περιεκτικότητα (kg/kg fuel) στα συστατικά του c,h,s,o και n, οπότε ο μοριακός τύπος του καυσίμου υπολογίζεται από τις σχέσεις:

$$\circ m = c * M_f / M_c \quad (3.5)$$

$$\circ n = 2 * h * M_f / M_{H2} \quad (3.6)$$

$$\circ p = s * M_f / M_s \quad (3.7)$$

$$\circ q = 2 * o * M_f / M_{O2} \quad (3.8)$$

$$\circ r = 2 * n * M_f / M_{N2} \quad (3.9)$$

Για να καθορίσουμε την απόλυτη ενθαλπία του αντιδρώντος στο αρχείο εισόδου του CEA καλό θα ήταν πρώτα να ορίσουμε τις έννοιες της απόλυτης ενθαλπίας και της θερμογόνου δύναμης.

Η απόλυτη ενθαλπία h (σε J/mol) ενός στοιχείου ή μιας χημικής ένωσης σε θερμοκρασία T ορίζεται ως:

$$h(T) = h_f^o(T_{ref}) + \Delta h_s(T) \quad (3.10)$$

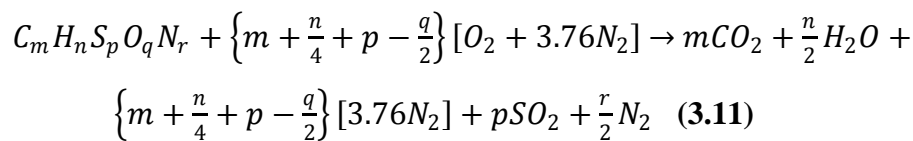
ως το άθροισμα δηλαδή της ενθαλπίας σχηματισμού h_f^o της ουσίας στη θερμοκρασία αναφοράς T_{ref} (συνήθως 298.15K) και της αισθητής ενθαλπίας Δh_s λόγω μεταβολής της θερμοκρασίας από T_{ref} σε T . Κάποια στοιχεία επομένως που θα πρέπει να κρατήσουμε για την ανάλυση που θα ακολουθήσει είναι:

- Όταν μια ουσία βρίσκεται στη θερμοκρασία αναφοράς T_{ref} (298.15K), που είναι και η συνηθέστερη περίπτωση για τα καύσιμα πριν από την καύση, η

απόλυτη ενθαλπία ταυτίζεται με την ενθαλπία σχηματισμού (formation enthalpy).

- Για τα στοιχεία τα οποία απαντώνται ελεύθερα στη φύση όπως Ar, O₂, N₂ κτλ. η ενθαλπία σχηματισμού είναι μηδενική.
- Όπως είδαμε σε προηγούμενη ενότητα στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA υπάρχουν οι απαραίτητοι συντελεστές (a₁, a₂, κτλ.) προκειμένου να υπολογίζουμε την απόλυτη ενθαλπία ενός στοιχείου που είναι καταχωρημένο σ' αυτήν, συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Η **θερμογόνος δύναμη** ενός καυσίμου υπολογίζεται όταν στοιχειομετρικό μείγμα αντιδρώντων (καυσίμου και αέρα), εισέρχεται σε θάλαμο καύσης σε συνθήκες αναφοράς (συνήθως 298.15K και P=1bar) καίγεται πλήρως και τα προϊόντα της καύσης εξέρχονται από το θάλαμο πάλι σε συνθήκες αναφοράς. Έχουμε δηλαδή την αντίδραση:



Προκειμένου τα προϊόντα της καύσης να επανέλθουν σε συνθήκες αναφοράς θα πρέπει να απομακρυνθεί θερμότητα από το σύστημα. Η θερμότητα αυτή της αντίδρασης Δh_R μπορεί να υπολογισθεί με εφαρμογή του 1ου Θ.Α.:

$$\Delta h_R (T_{ref}) = H_{prod}(T_{ref}) - H_{react}(T_{ref}) \quad (3.12)$$

Η θερμογόνος δύναμη του καυσίμου είναι ίση και αντίθετη με την θερμότητα αντίδρασης και επομένως δίνεται από τη σχέση:

$$HV(T_{ref}) = H_{react}(T_{ref}) - H_{prod}(T_{ref}) \quad (3.13)$$

Από την προηγούμενη σχέση και από την γενικευμένη αντίδραση στοιχειομετρικής καύσης (3.11), έχουμε για την κατώτερη θερμογόνο δύναμη [Lower Heating Value] του καυσίμου (επειδή το νερό στα προϊόντα είναι σε αέρια φάση):

$$LHV(T_{ref}) = (1) \times h_{C_m H_n S_p O_q N_r}(T_{ref}) + \left\{ m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2} \right\} \times h_{O_2}(T_{ref}) - m \times h_{CO_2}(T_{ref}) - \frac{n}{2} \times h_{H_2O}(T_{ref}) - p \times h_{SO_2}(T_{ref}) - \frac{r}{2} \times h_{N_2}(T_{ref}) \quad (3.13)$$

$$\rightarrow h_{C_m H_n S_p O_q N_r}(T_{ref}) = LHV(T_{ref}) + m \times h_{CO_2}(T_{ref}) + \frac{n}{2} \times h_{H_2O}(T_{ref}) + p \times h_{SO_2}(T_{ref}) + \frac{r}{2} \times h_{N_2}(T_{ref}) - \left\{ m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2} \right\} \times h_{O_2}(T_{ref}) \quad (3.14)$$

ενώ αν γνωρίζουμε την ανώτερη θερμογόνο δύναμη [Higher Heating Value] του καυσίμου (το νερό στα προϊόντα είναι στην υγρή φάση) προκύπτει αντίστοιχα:

$$h_{C_m H_n S_p O_q N_r}(T_{ref}) = HHV(T_{ref}) + m \times h_{CO_2}(T_{ref}) + \frac{n}{2} \times h_{H_2O(L)}(T_{ref}) + p \times h_{SO_2}(T_{ref}) + \frac{r}{2} \times h_{N_2}(T_{ref}) - \left\{ m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2} \right\} \times h_{O_2}(T_{ref}) \quad (3.15)$$

Έχοντας επομένως:

- την ανώτερη ή κατώτερη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου στη θερμοκρασία αναφοράς που μας ενδιαφέρει και
- τις απόλυτες ενθαλπίες των H₂O, H₂O(L), CO₂, SO₂, O₂ και N₂ από τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA, υπολογισμένες για την παραπάνω θερμοκρασία

μπορούμε να υπολογίσουμε την απόλυτη ενθαλπία του καυσίμου $h_{C_m H_n S_p O_q N_r}$ και να κάνουμε τους υπολογισμούς που θέλουμε με το CEA.

Και αντίστροφα εάν έχουμε:

- την απόλυτη ενθαλπία του καυσίμου $h_{C_m H_n S_p O_q N_r}$ ή την ενθαλπία σχηματισμού εάν είμαστε στη θερμοκρασία αναφοράς
- τις απόλυτες ενθαλπίες των H₂O, H₂O(L), CO₂, SO₂, O₂ και N₂ από τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA, υπολογισμένες για την παραπάνω θερμοκρασία

μπορούμε να υπολογίσουμε τη ανώτερη ή κατώτερη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου.

Με βάση τα δύο παραπάνω σκεπτικά αναπτύχθηκαν δύο υπολογιστικοί κώδικες γραμμένοι σε Fortran:

- `apoliti_enthalpia.for` ο οποίος υπολογίζει τον μοριακό τύπο του καυσίμου και την απόλυτη ενθαλπία στη θερμοκρασία αναφοράς στην οποία βρίσκεται το καύσιμο πριν από την καύση

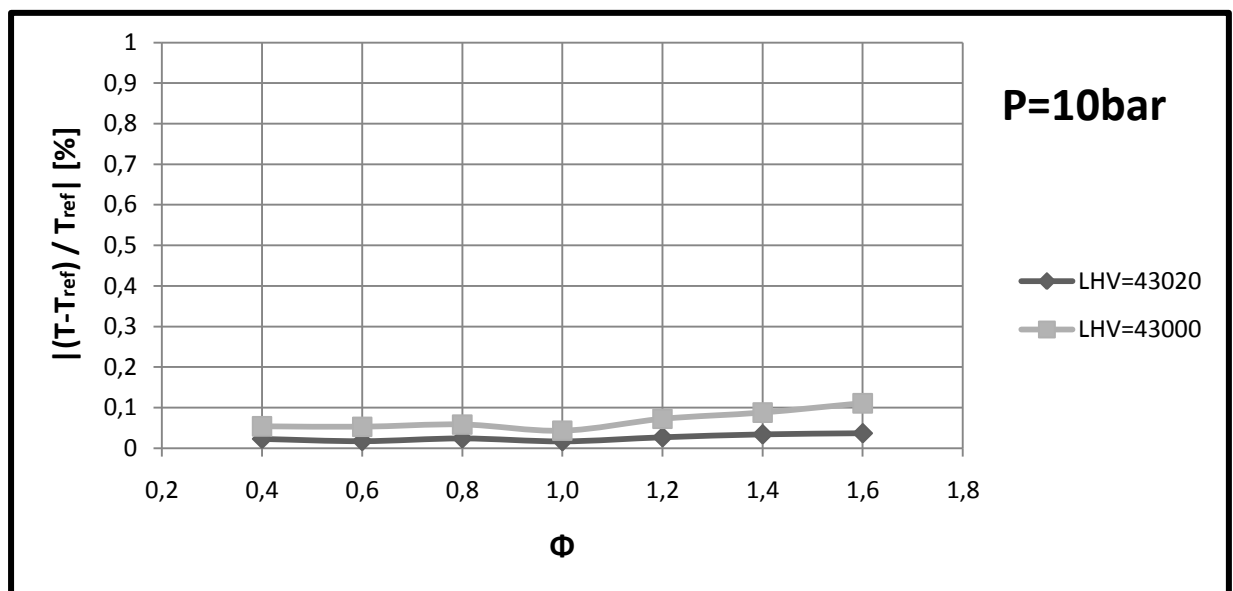
- thermogonos_dinami.for ο οποίος υπολογίζει τον μοριακό τύπο του καυσίμου και την ανώτερη ή κατώτερη (συνήθως αυτή μας ενδιαφέρει στους υπολογισμούς μας γιατί τα προϊόντα της καύσης είναι σε υψηλές θερμοκρασίες και το νερό βρίσκεται σε αέρια φάση) θερμογόνο δύναμη του καυσίμου στη θερμοκρασία αναφοράς για την οποία έχει δοθεί η απόλυτη ενθαλπία.

Οι δύο αυτοί κώδικες παρατίθενται στο παράρτημα Π3 της εργασίας.

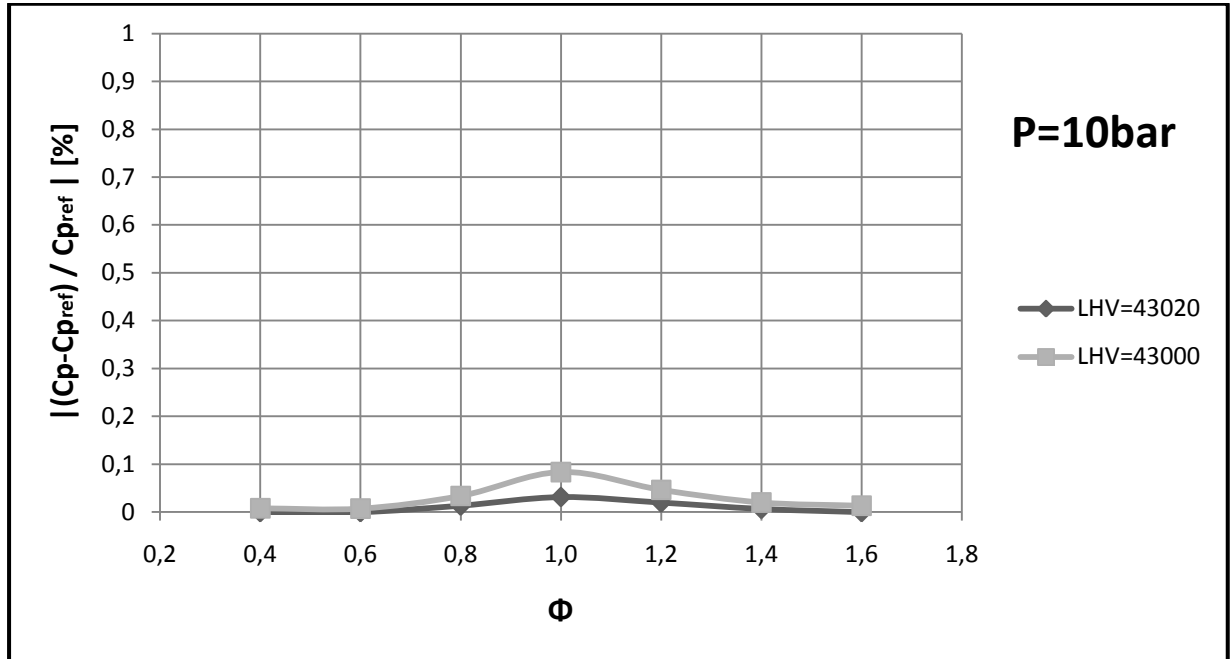
Τέλος με βάση τον κώδικα aroliti_enthalpia.for έγινε μια μελέτη (σχήμα 3.15) για την απόκλιση που έχουμε σε θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου κατά την καύση του «άγνωστου» Jet-A (με μοριακό τύπο $C_{12}H_{23}$ [17]), στα 10bar, από τις τιμές που προκύπτουν με χρήση της θερμοδυναμικής βιβλιοθήκης του NASA CEA (τιμές αναφοράς) αν θεωρήσουμε στους 298.15K:

- LHV = 43020 KJ/Kg [18]
- LHV = 43000 KJ/Kg [19]

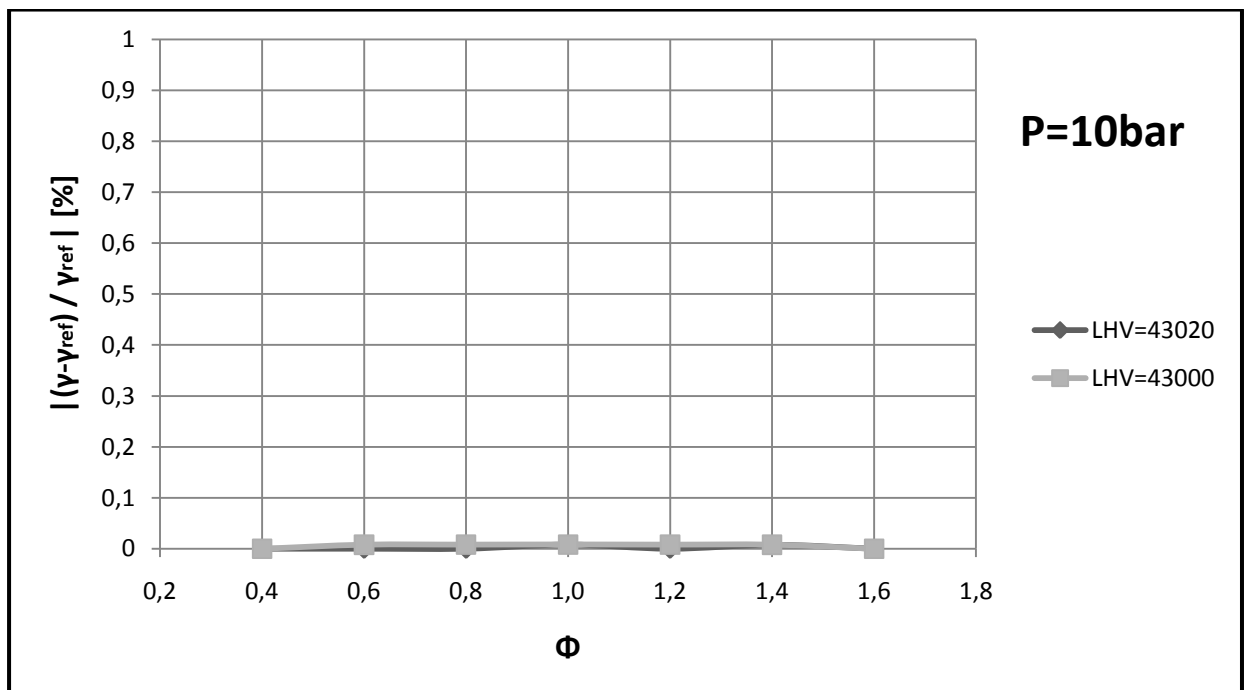
Παρατηρούμε ότι οι αποκλίσεις είναι πολύ μικρές, σχεδόν αμελητέες (<0.1%) και έτσι η μέθοδος αυτή μπορεί να μας δώσει εξίσου αξιόπιστα αποτελέσματα.



Σχήμα 3.16: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ' απόλυτη τιμή, της αδιαβατικής θερμοκρασίας T που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.



Σχήμα 3.17: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ' απόλυτη τιμή, της ειδικής θερμοχωρητικότητας υπό σταθερή πίεση C_p που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.

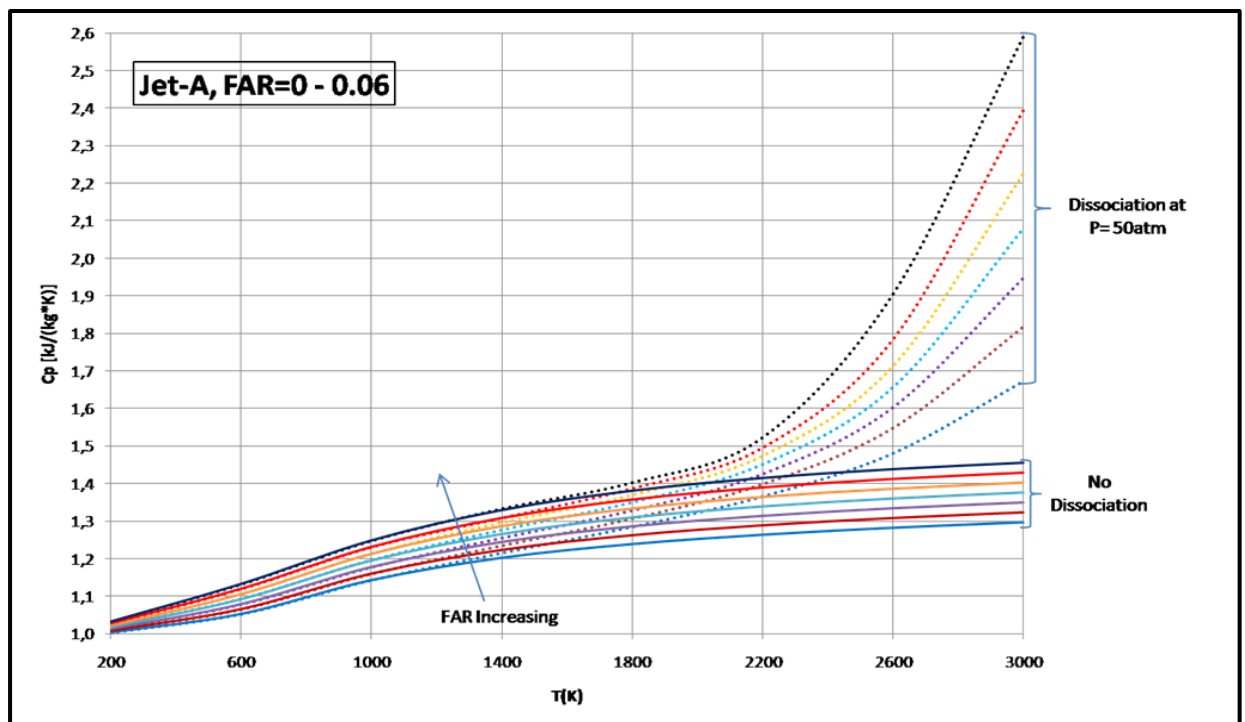


Σχήμα 3.18: Ποσοστιαία απόκλιση, κατ' απόλυτη τιμή, του ισεντροπικού εκθέτη γ που προκύπτει από τις διάφορες υποθέσεις για τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου από την τιμή που προκύπτει με τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του NASA CEA.

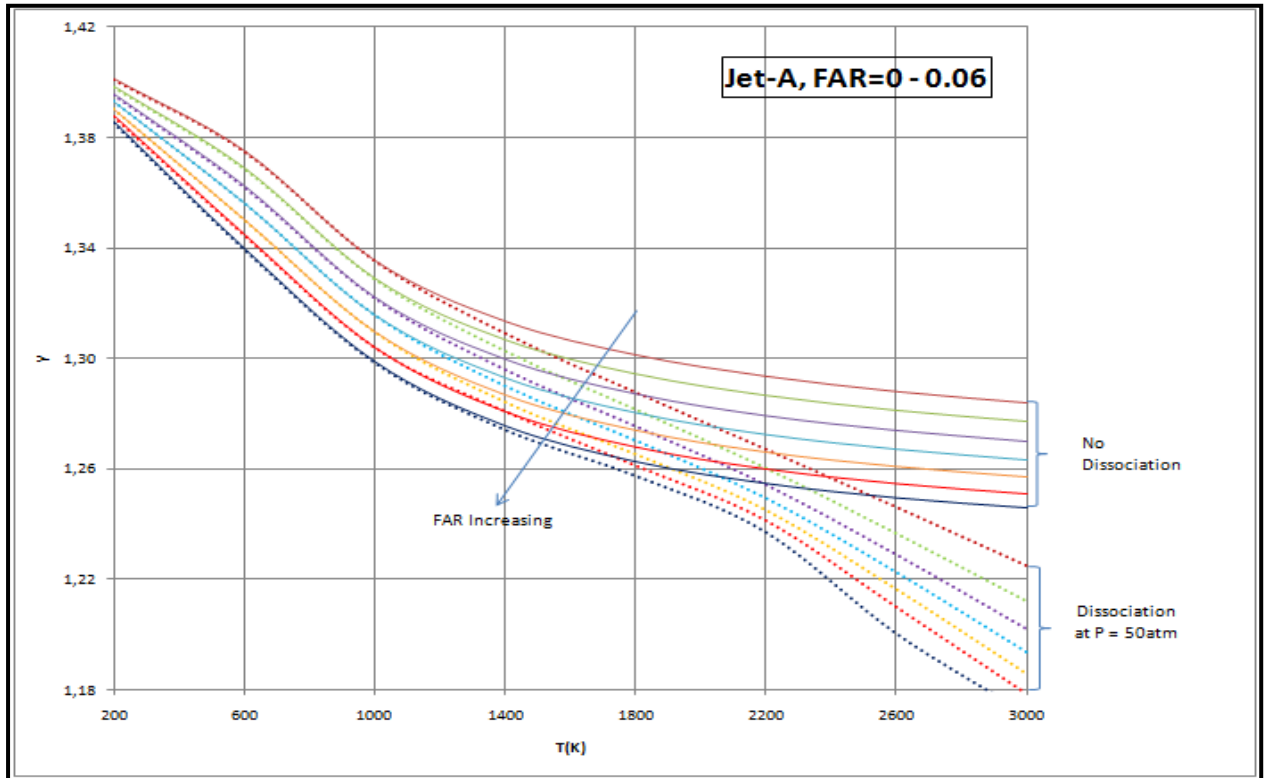
3.4 Επίδραση χημικής διάστασης στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου

Όπως έγινε αντιληπτό από τα παραπάνω, το λογισμικό CEA της NASA μας δίνει τη δυνατότητα να μελετήσουμε πληθώρα προβλημάτων καύσης. Κάποια από τα ερωτήματα που άμεσα προκύπτουν από το προηγούμενο κεφάλαιο, που παρουσιάζει τις μεθόδους μοντελοποίησης της καύσης, είναι η επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου καθώς και οι αποκλίσεις που εισάγονται από την αγνόησή της.

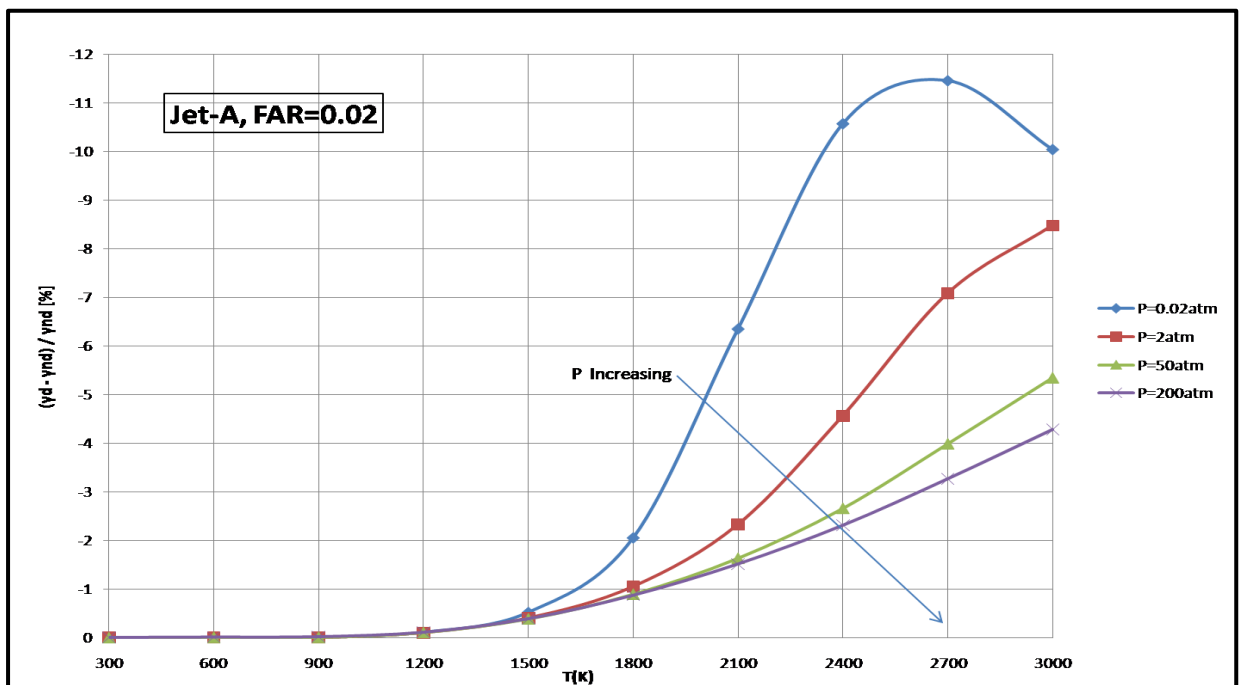
Έτσι λοιπόν μελετώντας στο CEA την καύση του Jet-A(L) με ξηρό αέρα, για διάφορες συνθήκες καύσης, με το μοντέλο σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης (no dissociation model), όπου έχουμε σαν πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία μόνο τα Ar, CO₂, H₂O, N₂ και O₂ καθώς και με το μοντέλο της πλήρους διάστασης των προϊόντων της καύσης (dissociation model), όπου αφήνουμε όλα τα στοιχεία να ληφθούν υπόψη σαν πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία, παίρνουμε τα αποτελέσματα που φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα:



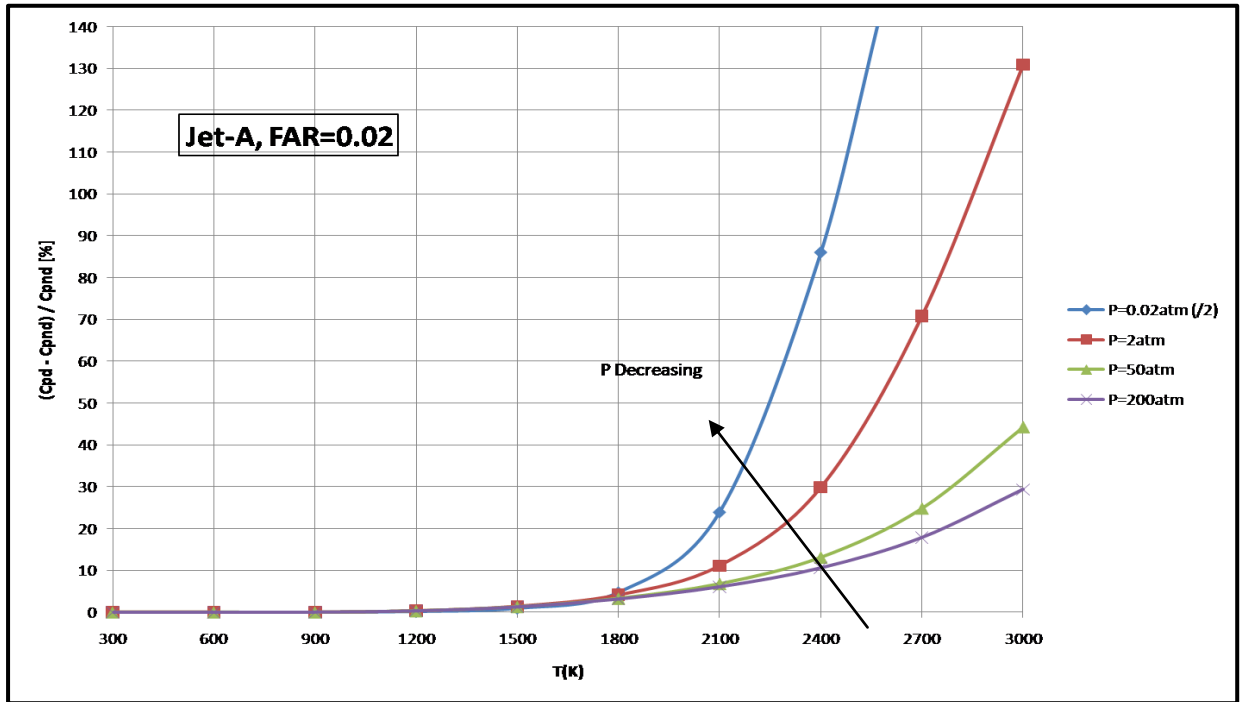
Σχήμα 3.19: Επίδραση του λόγου καυσίμου-αέρα (FAR) και της χημικής διάστασης στην ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.



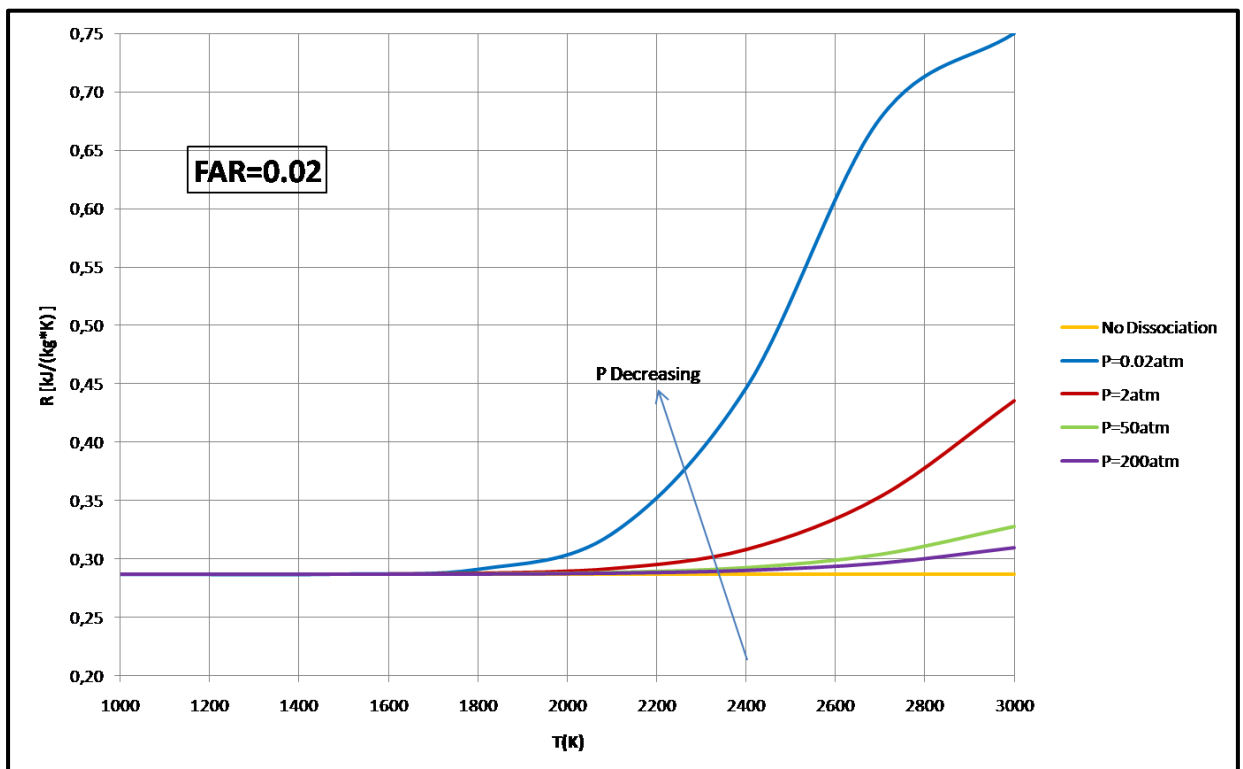
Σχήμα 3.20: Επίδραση του λόγου καυσίμου-αέρα (FAR) και της χημικής διάστασης στον ισεντροπικό εκθέτη γ για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.



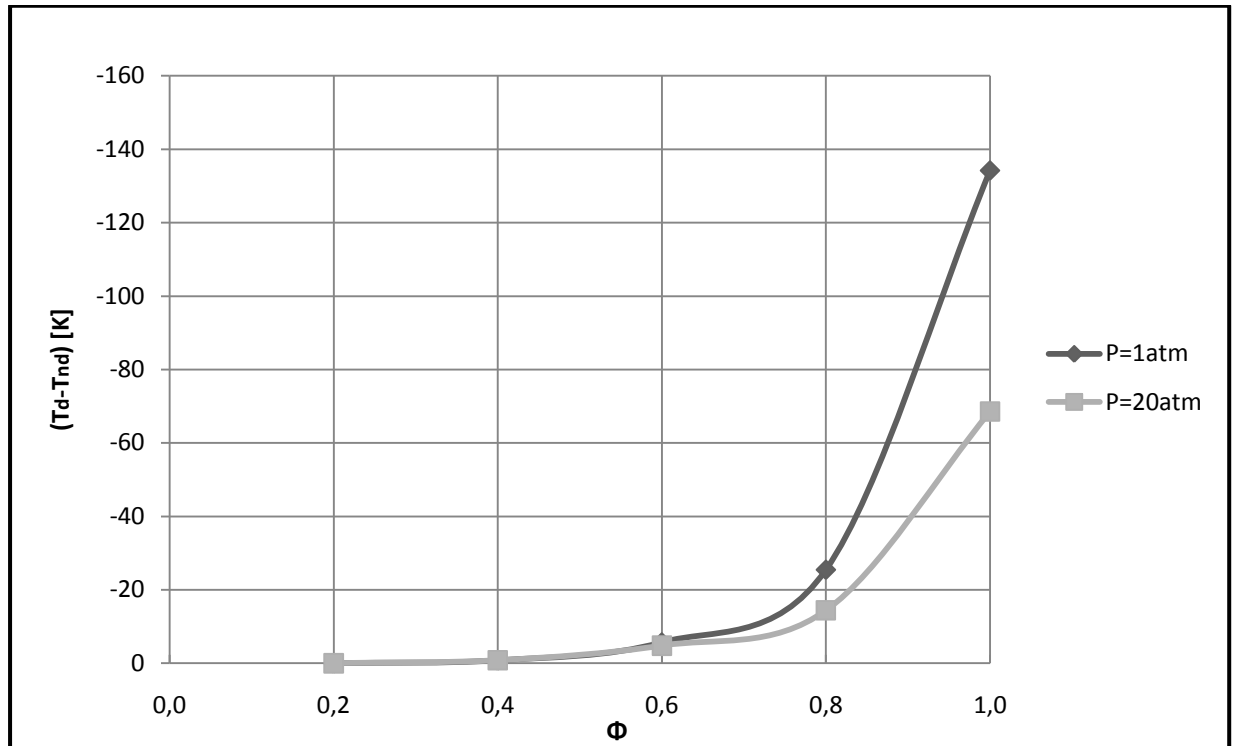
Σχήμα 3.21: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην ποσοστιαία απόκλιση του γ εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.



Σχήμα 3.22: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην ποσοστιαία απόκλιση του C_p εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.



Σχήμα 3.23: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην σταθερά των αερίων R για τα προϊόντα της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.



Σχήμα 3.24: Επίδραση της πίεσης και της χημικής διάστασης στην απόλυτη απόκλιση της αδιαβατικής θερμοκρασίας καύσης T εξαιτίας της διάστασης των προϊόντων της καύσης του Jet-A με το λογισμικό NASA CEA.

Από τα προηγούμενα σχήματα επιβεβαιώνονται τα εξής:

- Τα φαινόμενα χημικής διάστασης γίνονται αισθητά για θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 1500K, που επιτυγχάνονται εύκολα στο θερμό κομμάτι των αεροστροβίλων.
- Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία και όσο μειώνεται η πίεση τα φαινόμενα της χημικής διάστασης γίνονται εντονότερα (αρχή LeChatelier).
- Το παραπάνω επίσης ισχύει σε μικρότερο βαθμό και για αύξηση του λόγου FAR.
- Η χρησιμοποίηση για τους υπολογισμούς της καύσης ενός μοντέλου που αγνοεί την επίδραση της χημικής διάστασης (no dissociation model), για τις συνήθεις περιοχές λειτουργίας των σύγχρονων αεροστροβίλων [περίπου $P_{t4}=20\text{atm}$ κ' $T_{t4} = 2000\text{K}$], εισάγει αποκλίσεις της τάξης του:
 - 2-3% για το γ
 - 7-8% για το C_p

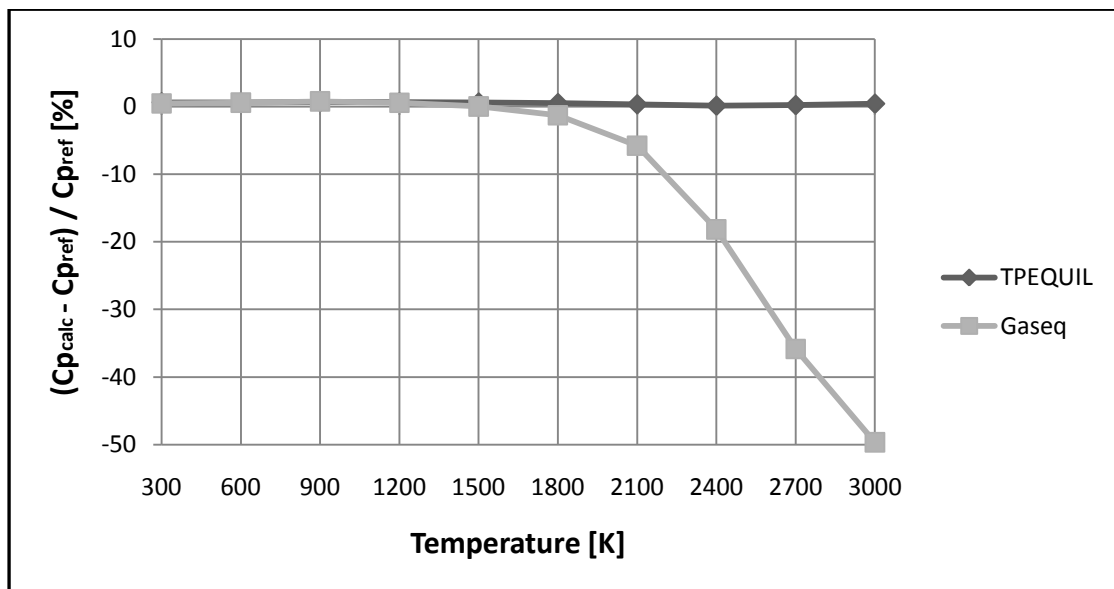
– 2% για το R

σε σχέση με το μοντέλο χημικής διάστασης. Επίσης για μείγμα αντιδρώντων με λόγο ισοδυναμίας καυσίμου Φ κοντά στην μονάδα (στοιχειομετρική καύση) η απόκλιση της θερμοκρασίας φτάνει τους 60K σε σχέση με την τιμή που προκύπτει από το μοντέλο της χημικής διάστασης.

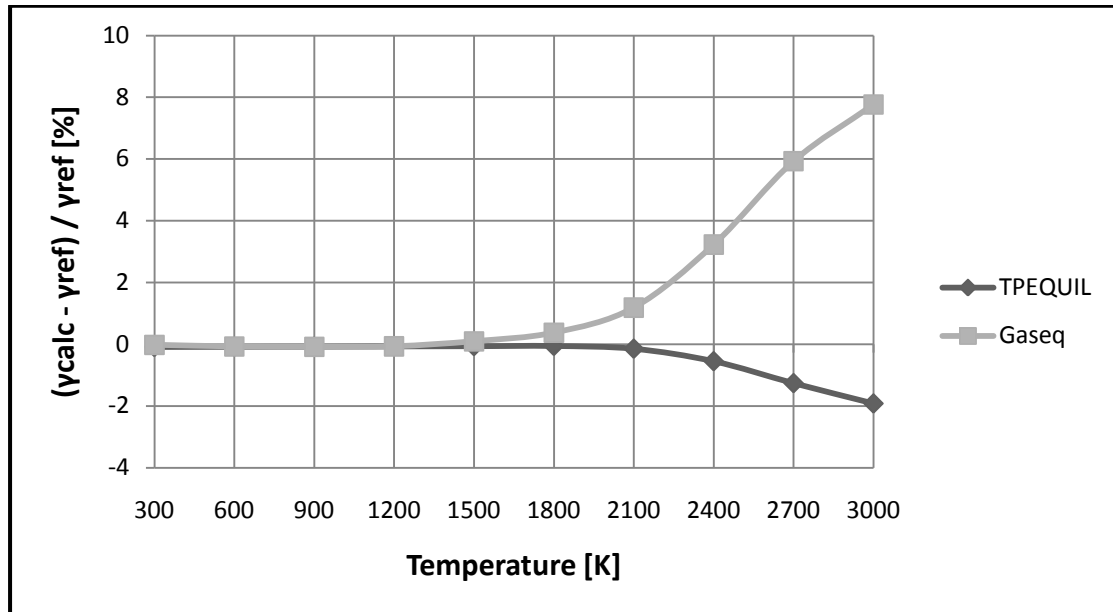
Τα σφάλματα αυτά είναι αρκετά σημαντικά και δεν θα πρέπει να αγνοούνται όταν θέλουμε να κάνουμε ακριβείς υπολογισμούς και σχεδίαση της μηχανής.

3.5 Επίδραση λογισμικού χημικής ισορροπίας στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου

Στην ενότητα 2.2.1 του προηγούμενου κεφαλαίου αναφέρθηκαν τρία πολύ κοινά χρησιμοποιούμενα λογισμικά χημικής ισορροπίας: TPEQUIL, Gaseq και το CEA. Στην ενότητα αυτή γίνεται μια ενδεικτική μελέτη για την επίδραση που έχει το κάθε λογισμικό στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου (C_p και γ) που παράγεται από την καύση με πλήρη διάσταση του Μεθανίου για $\Phi = 0.9$, θερμοκρασίες $T = 300 \div 3000K$ και πίεση $P=20atm$ (τη πρόβλημα). Οι αποκλίσεις φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα θεωρώντας τις τιμές του CEA ως αναφορά:



Σχήμα 3.25: Ποσοστιαία απόκλιση του C_p του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση με πλήρη διάσταση του Μεθανίου για $\Phi=0.9$ και $P=20atm$ με τα λογισμικά TPEQUIL και Gaseq από το CEA.



Σχήμα 3.26: Ποσοστιαία απόκλιση του ισεντροπικού εκθέτη του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση με πλήρη διάσταση του Μεθανίου για $\Phi=0.9$ και $P=20\text{atm}$ με τα λογισμικά TPEQUIL και Gaseq από το CEA.

Από τα διαγράμματα αυτά διαπιστώνουμε ότι οι αποκλίσεις του λογισμικού TPEQUIL από το CEA είναι σχετικά μικρές, της τάξης του 0.4% για το C_p και το 1.9% για το γ . Το ίδιο ωστόσο δεν ισχύει για το Gaseq όπου οι αντίστοιχες αποκλίσεις πλησιάζουν το 50% και 8%.

Στη βιβλιογραφία δεν υπάρχει κάποια μελέτη που να ταξινομεί τα λογισμικά χημικής ισορροπίας με βάση την ακρίβεια των αποτελεσμάτων τους. Επομένως θα δεχτούμε ότι κανένα από τα παραπάνω λογισμικά δεν είναι καλύτερο από τ' άλλα [9]. Ωστόσο για το Gaseq έχουν διατυπωθεί κάποια προβλήματα σχετικά με τους υπολογισμούς του μοντέλου που υποθέτει πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης [20].

3.6 Σύνοψη – Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό αναλύθηκε εκτενώς το λογισμικό χημικής ισορροπίας Chemical Equilibrium with Applications της NASA. Αρχικά παρουσιάστηκαν οι δυνατότητες και τα χαρακτηριστικά που το κάνουν να είναι ένα από τα πιο κοινά χρησιμοποιούμενα λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης στους αεριοστρόβιλους.

Αφού περιγράφηκε η βασική του δομή έγινε μια βήμα προς βήμα ανάλυση για το πώς δημιουργούμε το αρχείο εισόδου και το πως χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα είτε σε περίπτωση που όλα τα αντιδρώντα βρίσκονται στη θερμοδυναμική του βιβλιοθήκη είτε σε περίπτωση που κάποιο από αυτά καθορίζεται από το χρήστη. Η ανάλυση αυτή για την 1^η περίπτωση συνοδεύτηκε από την επίλυση μιας πρακτικής εφαρμογής για μεγαλύτερη κατανόηση ενώ παρουσιάστηκαν δύο κώδικες σε Fortran που είναι ιδιαίτερα χρήσιμοι στη περίπτωση που έχουμε επίλυση προβλήματος με «άγνωστα» για το CEA αντιδρώντα.

Έπειτα έγινε μια ανάλυση για την επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου του Jet-A καθώς και οι διαφορές που εισάγονται από την αγνόησή της. Παρατηρήθηκαν σημαντικές αποκλίσεις σε χαρακτηριστικά μεγέθη όπως στο γ , Cp, R και στη θερμοκρασία της καύσης και τονίστηκε η ανάγκη για χρησιμοποίηση του μοντέλου της χημικής ισορροπίας με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης για ακριβέστερους υπολογισμούς ειδικά στο θερμό κομμάτι της μηχανής όπου παρατηρούνται και υψηλότερες θερμοκρασίες.

Τέλος έγινε μια σύντομη ανάλυση για την επίδραση των κυριότερων λογισμικών χημικής ισορροπίας στις ιδιότητες του καυσαερίου που παράγεται από την καύση του μεθανίου και παρατηρήθηκε η ανακρίβεια που εισάγουν στους υπολογισμούς.

4. Επέκταση Δυνατοτήτων του Λογισμικού PROOSIS & Εφαρμογές σε Επίπεδο Μηχανής

Το κεφάλαιο αυτό ξεκινάει με μια σύντομη μελέτη για τους τρόπους με τους οποίους μοντελοποιείται το εργαζόμενο μέσο για να γίνουν στη συνέχεια οι απαραίτητοι υπολογισμοί από το λογισμικό προσομοίωσης αεριοστρόβιλων. Αφού τονισθούν τα πλεονεκτήματα της μεθόδου της δημιουργίας πινάκων από προγράμματα μοντελοποίησης καύσης, όπως το CEA, περιγράφεται το λογισμικό PROOSIS που κάνει χρήση των πινάκων αυτών για να κάνει προσομοίωση της λειτουργίας της μηχανής.

Στη συνέχεια αναλύεται η διαδικασία με την οποία από το λογισμικό της NASA και κάποιους κώδικες που γράφτηκαν σε Fortran μπορούμε να αναπαράγουμε τους πίνακες αυτούς για το PROOSIS για διάφορα καύσιμα (πέραν του Jet-A) και μοντέλα καύσης. Τέλος με τη χρησιμοποίηση των πινάκων του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS μελετάμε την επίδραση που έχουν παράμετροι όπως η χημική διάσταση και η σύνθεση του καυσίμου σε επίπεδο μηχανής για δύο κινητήρες.

4.1 Τρόποι μοντελοποίησης εργαζόμενου μέσου

Από το προηγούμενο κεφάλαιο έγινε αντιληπτό ότι για να έχουμε ένα αξιόπιστο υπολογιστικό μοντέλο εργαζόμενου μέσου θα πρέπει τουλάχιστον τα καυσαέρια να υπολογίζονται με βάση την χημική διάσταση (ακόμα και ο αέρας δίσταται αλλά σε μικρές ποσότητες λόγω και των χαμηλών σχετικά θερμοκρασιών πριν το θάλαμο καύσης <math><1000\text{K}</math>). Η ύπαρξη ενός ακριβούς και αξιόπιστου μοντέλου εργαζόμενου μέσου είναι πολύ βασικό για κάθε πρόγραμμα μοντελοποίησης αεριοστρόβιλων καθώς δίνει τα απαραίτητα θεμέλια προκειμένου να μειωθούν οι παράγοντες αβεβαιότητας ανάλυσης της λειτουργίας της μηχανής.

Η μοντελοποίηση του εργαζόμενου μέσου μπορεί κατά κύριο λόγο να γίνει με δύο τρόπους. Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου μπορούν να ανακτηθούν είτε από πολυωνυμικές συναρτήσεις είτε από γραμμική (ή σε ορισμένες περιπτώσεις λογαριθμική) παρεμβολή σε πίνακες. Η δημιουργία πινάκων μοντελοποίησης του εργαζόμενου μέσου είτε από πολυωνυμικές εκφράσεις (Walsh

and Fletcher 8th order polynomial functions) είτε από λογισμικό χημικής ισορροπίας, όπως είναι το NASA CEA, θέλει πολύ περισσότερη επεξεργασία και χρόνο από την κατευθείαν εφαρμογή των πολυωνυμικών σχέσεων. Παρουσιάζει ωστόσο μια σειρά από σημαντικά πλεονεκτήματα [20]:

- Σε περίπτωση που πρόκειται να αλλάξει το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου, είναι ασφαλέστερο από αριθμητικής άποψης να αλλάξουν οι τιμές ενός πίνακα παρά να αλλάξει μια ολόκληρη συνάρτηση. Στην πρώτη περίπτωση θα εξακολουθεί να γίνεται παρεμβολή στα σημεία του πίνακα ενώ στη δεύτερη περίπτωση αλλαγή της συνάρτησης θα επηρέαζε τη σύγκλιση των εσωτερικών επαναλήψεών της.
- Το εύρος και η ακρίβεια των τιμών του πίνακα μπορούν εύκολα να αυξηθούν βελτιώνοντας την ανάλυση του πίνακα σε μεγαλύτερο φάσμα. Το μοναδικό μειονέκτημα σε αυτή την περίπτωση είναι οι αυξημένες απαιτήσεις των πινάκων σε χωρητικότητα, το οποίο βέβαια δεν είναι πρόβλημα για τα σημερινά υπολογιστικά συστήματα. Από την άλλη μεριά το εύρος των τιμών στο οποίο οι πολυωνυμικές συναρτήσεις είναι έγκυρες είναι περιορισμένο και δεν μπορεί να επεκταθεί.
- Η χρήση πινάκων με τις ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου είναι ασφαλέστερο γιατί ακόμα και εάν αποκρυπτογραφηθούν οι πίνακες δεν φανερώνουν το μοντέλο που χρησιμοποιείται παρά μόνο αλληλουχίες τιμών.
- Επίσης δεν είναι εύκολο να βρούμε στη βιβλιογραφία πολυωνυμικές συναρτήσεις που να λαμβάνουν υπόψη την επίδραση της ατμοσφαιρικής υγρασίας (WAR) ή της χημικής διάστασης στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου. Αντίθετα οι πίνακες του εργαζόμενου μέσου μας δίνουν τη δυνατότητα να εκφράσουμε οποιαδήποτε θερμοδυναμική ιδιότητα σε συνάρτηση όσων παραμέτρων θέλουμε, με μοναδικό μειονέκτημα την ύπαρξη πολυδιάστατων πινάκων.

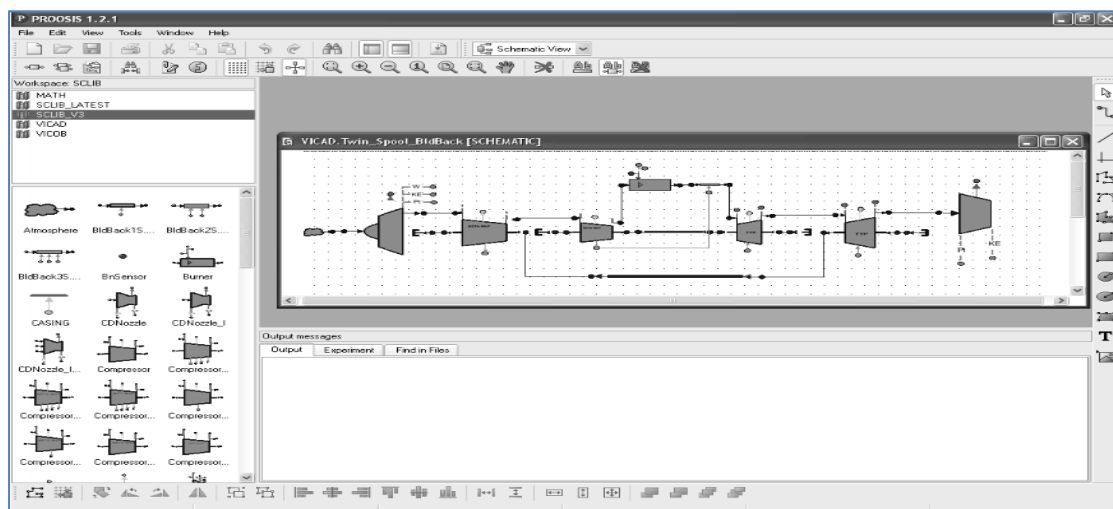
Στην ακόλουθη ενότητα παρουσιάζεται το λογισμικό προσομοίωσης της λειτουργίας αεριοστρόβιλων PROOSIS που χρησιμοποιεί πίνακες με τις θερμοδυναμικές ιδιότητες για μοντέλο του εργαζόμενου μέσου.

4.2 Περιγραφή PROOSIS

Το PROOSIS (PRopulsion Object Oriented SIMulation Software) είναι ένα λογισμικό μοντελοποίησης της λειτουργίας και της απόδοσης των αεριοστροβίλων που αναπτύχθηκε σαν κομμάτι του προγράμματος VIVACE-ECP της Ευρωπαϊκής ένωσης. Στόχος του PROOSIS είναι να παρέχει στην Ευρωπαϊκή κοινότητα ένα πρότυπο με μεθοδολογίες για τη μοντελοποίηση των αεριοστροβίλων ενώ συγχρόνως δίνει τη δυνατότητα σε εταιρίες, ερευνητικά κέντρα και πανεπιστήμια να χρησιμοποιούν ένα κοινό εργαλείο για την προσομοίωση των μηχανών αυτών.

Το λογισμικό χρησιμοποιείται ευρύτατα στη ευρωπαϊκή βιομηχανία και έρευνα. Ενδεικτικά αναφέρονται Airbus, Alenia Aeronautica, Avio, MTU, Πολυτεχνείο Μιλάνου, Πολυτεχνείο Τορίνο, Xerox Italia S.p.A, ESOCCNET, Turbomecha SA, Volvo Aero Corporation, Snecma, Iberespacio, NLR, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Πανεπιστήμιο Στουτγάρδης.

Το PROOSIS είναι ένα λογισμικό διασύνδεσης των επιμέρους συνιστωσών σε μια διάταξη (object oriented). Έτσι μας δίνει τη δυνατότητα να δημιουργούμε εξελιγμένα και πολύπλοκα μοντέλα μηχανών συνδέοντας βασικές συνιστώσες του αεριοστροβίλου π.χ. μια μηχανή διπλού ρεύματος διπλού τυμπάνου (turbofan) μπορεί να μοντελοποιηθεί στο πρόγραμμα συνδέοντας συμπιεστές, στροβίλους, ατράκτους, ένα ακροφύσιο, μια δεξαμενή καυσίμου κτλ. σε μια διάταξη. Στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται η συγκρότηση μιας μηχανής διπλού τυμπάνου απλού ρεύματος στο PROOSIS.



Σχήμα 4.1: Μοντέλο μηχανής διπλού τυμπάνου απλού ρεύματος στο PROOSIS.

Ως βάση για την πραγματοποίηση υπολογισμών στο PROOSIS χρησιμοποιούνται πίνακες μοντελοποίησης του εργαζόμενου μέσου σε xml μορφή, είτε λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της πλήρους χημικής διάστασης (dissociation model) είτε υποθέτοντας σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης (no dissociation model). Για το PROOSIS το εργαζόμενο μέσο στους αεριοστροβίλους είναι ιδανικό αέριο, είτε αέρας (FAR=0) είτε καυσαέρια (FAR>0) που έχουν προκύψει από την καύση οποιουδήποτε καυσίμου στο θάλαμο καύσης.

Από τους τρισδιάστατους αυτούς πίνακες λαμβάνονται με γραμμική παρεμβολή οι ακόλουθες ιδιότητες για το εργαζόμενο μέσο:

- **Ειδική Ενθαλπία h (J/kg)** η οποία ορίζεται από τη σχέση:

$$h(T) = h_{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^T C_p(T) dT \quad (4.1)$$

όπου T_{ref} μια ορισμένη θερμοκρασία αναφοράς (συνήθως 298.15K)

$C_p(T)$ είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση σε συνάρτηση της θερμοκρασίας

Συνάρτηση εντροπίας φ (J/(kg*K))

$$\varphi = \int_{T_2}^{T_{ref}} \frac{C_p}{T} dT = S(T_2, P_2) - S(T_{ref}, P_{ref}) + R \times \ln\left(\frac{P_2}{P_{ref}}\right) \quad (4.2)$$

όπου $S(T_2, P_2) - S(T_{ref}, P_{ref})$ η διαφορά της ειδικής εντροπίας ανάμεσα σε μια οποιαδήποτε κατάσταση (T_2, P_2) και σε μια κατάσταση αναφοράς (T_{ref}, P_{ref}). Συνήθως $T_{ref} = 298.15K$ και $P_{ref} = 1bar$ όπως στο NASA CEA.

- **Ισεντροπικός εκθέτης γ**
- **Σταθερά του αερίου R (J/(kg*K))**

$$R = \frac{R_u}{M} = \frac{8.3143 \text{ J/(mol} \times \text{K)}}{M} \quad (4.3)$$

όπου M το μοριακό βάρος του αερίου

- **Δυναμική συνεκτικότητα μ (Pa*sec)**

Η δυναμική συνεκτικότητα είναι μια ιδιότητα μεταφοράς θερμότητας και χρησιμοποιείται για να υπολογιστεί ο αριθμός Reynolds από τη σχέση:

$$Re = \rho * D * V / \mu \quad (4.4)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, D μια αντιπροσωπευτική διάμετρος και V μια αντιπροσωπευτική ταχύτητα.

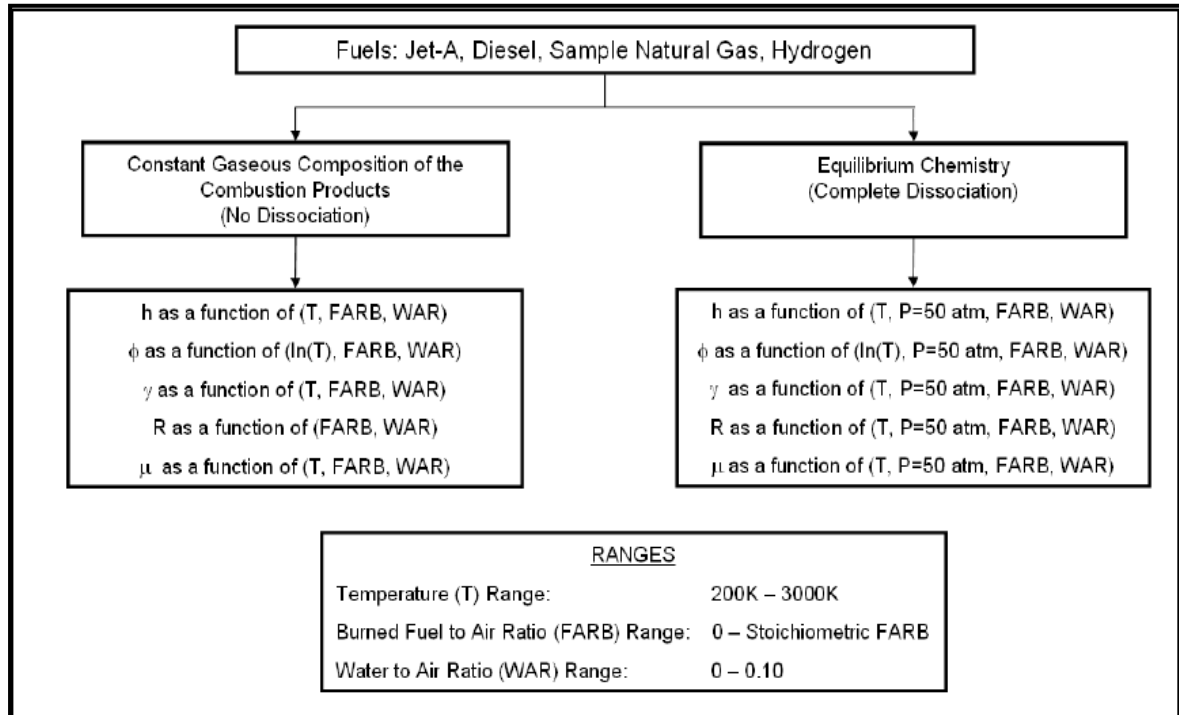
Τα παραπάνω μεγέθη προκύπτουν είτε έχουμε μοντέλο πλήρους χημικής διάστασης (dissociation model) είτε μοντέλο σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης (no dissociation model) για το ρευστό ως γραμμική συνάρτηση των τριών παραμέτρων:

- WAR
- Θερμοκρασία ή ο λογάριθμος της θερμοκρασίας αν θέλουμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση εντροπίας
- FAR

Το παραπάνω σκεπτικό βασίζεται στο 2^ο νόμο του Joule σύμφωνα με τον οποίο η εσωτερική ενέργεια ενός ιδανικού αερίου είναι ανεξάρτητη του όγκου και της πίεσεως και είναι συνάρτηση μονάχα της θερμοκρασίας. Αυτό βέβαια είναι σωστό μόνο για το μοντέλο που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης καθώς όπως είδαμε στα προηγούμενα κεφάλαια η πίεση παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στην χημική διάσταση και ότι όσο μειώνεται η πίεση τόσο εντονότερη είναι η διάσταση των προϊόντων της καύσης (LeChatelier). Επομένως για διαφορετικές πιέσεις αλλάζει η σύσταση των προϊόντων της καύσης και συνακόλουθα μεταβάλλονται και οι ιδιότητες του καυσαερίου.

Ωστόσο επειδή το PROOSIS μέχρι στιγμής υποστηρίζει τη χρήση μέχρι τριςδιάστατων πινάκων οι πέντε παραπάνω ιδιότητες για το μοντέλο της χημικής διάστασης υπολογίζονται ενδεικτικά για πίεση $P=50\text{atm}$ η οποία είναι η μέγιστη πίεση των σύγχρονων θαλάμων καύσης κατά την απογείωση των αεροσκαφών. Παρόλα αυτά δίνεται η δυνατότητα στο χρήστη να παράγει τους πίνακες αυτούς για τις πιέσεις που θέλει χωρίς να είναι υποχρεωμένος να χρησιμοποιήσει την εξορισμού πίεση των 50atm .

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται η γενική δομή του μοντέλου του εργαζόμενου μέσου του PROOSIS καθώς και ο πίνακας του εργαζόμενου μέσου σε xml μορφή για τον υπολογισμό της ειδικής ενθαλπίας του αέρα ($FAR=0$) και του καυσαερίου ($FAR>0$) που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) υποθέτοντας πλήρη χημική διάσταση στις 50atm .



Σχήμα 4.2: Μοντέλο του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS.

```

Sample PROOSIS Fluid Model XML Input File
Fuel: Jet-A
Fluid Model Type: Chemical Equilibrium (P=50atm)

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" standalone="no" ?>
<map version="1.0" type="Jet A Fluid Model With Complete Dissociation (50atm)" name="Dissociation50" description="Jet A Fluid Model With Complete Dissociation (50atm)" cdate="11/05/2007" mdate="" revision="0.1">
  <table type="3d" name="h_T" description="Enthalpy as a function of T, FARB and WAR">
    <interp default="LINEAR" valid="{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}" />
    <extrap default="CONSTANT" valid="{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}" />
    <axis1 id="WAR" description="Water to Air Ratio (-)" value="{0.00, 0.10}" />
    <axis2 id="T" description="Temperature(K)" value="{200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550, 600, 650, 700, 750, 800, 850, 900, 950, 1000, 1050, 1100, 1150, 1200, 1250, 1300, 1350, 1400, 1450, 1500, 1550, 1600, 1650, 1700, 1750,1800, 1850, 1900, 1950, 2000, 2050, 2100, 2150, 2200, 2250, 2300, 2350, 2400, 2450, 2500, 2550, 2600, 2650, 2700, 2750, 2800, 2850, 2900, 2950, 3000}" />
    <axis3 id="FARB" description="Burnt Fuel to Air Ratio (-)" value="{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}" />
    <return id="h" description="Specific Enthalpy (J/kg)" value="{ {-98466.2, -99790, -101100, -102300}, {-48333.2, -49060, -49800, -50400}, {1858.8, 1890, 1900, 1900}, {52175.8, 53120, 54000, 54900}, {102707.8, 104680, 106600, 108400}, {153553.8, 156670, 159700, 162500}, {204803.8, 209140, 213300, 217300}, {256533.8, 262180, 267600, 272800}, {308793.8, 315820, 322600, 329100}, {361643.8, 370100, 378200, 386100}, {415083.8, 425040, 434600, 443800}, {469133.8, 480650, 491700, 502400}, {523783.8, 536910, 549500, 561700}, {579013.8, 593800, 608000, 621700}, {634813.8, 651310, 667200, 682400}, {691143.8, 709420, 727000, 743900}, {747993.8, 768090, 787420, 806000}, {805353.8, 827315, 848440, 868700}, {863193.8, 887066.3, 910020, 932100}, {921493.8, 947323, 972150, 996000}, {980243.8, 1008070, 1034800, 1060400}, {1039434, 1069280, 1097960, 1125400}, {1099034, 1130960, 1161600, 1190900}, {1159034, 1193090, 1225720, 1256900}, {1219534, 1255660, 1290300, 1323400}, {1280434, 1318680, 1355340, 1390300}, {1341634, 1382130, 1420820, 1457600}, {1403334, 1446030, 1486760, 1525400}, {1465534, 1510380, 1553140, 1593610}, {1528034, 1575180, 1619970, 1662230}, {1591034, 1640440, 1687253, 1731280}, {1654434, 1706170, 1755005, 1800770}, {1718334, 1772380, 1823236, 1870700}, {1782534, 1839090, 1891960, 1941110}, {1847334, 1906270, 1961210, 2012030}, {1912534, 1974070, 2031000, 2083490}, {1978134, 2042370, 2101380, 2155570}, {2044334, 2111370, 2172380, 2228350}, {2110934, 2180870, 2244070, 2301920}, {2178034, 2251070, 2316500, 2376430}, {2245634, 2322070, 2389750, 2452013}, {2313834, 2393770, 2465920, 2528876}, {2382534, 2466270, 2539100, 2607237}, {2451834, 2539770, 2615430, 2697350}, {2521834, 2614170, 2693050, 2769510}, {2592334, 2689670, 2772100, 2854030}, {2663634, 2766470, 2852800, 2941230}, {2735634, 2844470, 2935300, 3031440}, {2808434, 2923870, 3019900, 3125000}, {2882134, 3004870, 3106800, 3222200}, {2956634, 3087570, 3196100, 3323310}, {3032234, 3172070, 3288300, 3428550}, {3108834, 3258570, 3348340, 3538090}, {3186534, 3347270, 3481800, 3652000}, {3265534, 3438270, 3583700, 3770500}, {3345834, 3531670, 3689200, 3893400}, {3427534, 3627770, 3798500, 4020900}, {-106100, -107100, -108200, -109200}, {-52100, -52700, -53300, -53800}, {2000, 2000, 2000, 2100}, {56200, 57000, 57800, 58500}, {110700, 112400, 114000, 115600}, {165700, 168300, 170800, 173300}, {221100, 224800, 228300, 231700}, {277060, 281900, 286500, 290900}, {333670, 339700, 345400, 350900}, {390950, 398200, 405100, 411800}, {448920, 457400, 465600, 473500}, {507590, 517400, 526900, 536000}, {566970, 578200, 589000, 599400}, {627030, 639700, 651800, 663600}, {687760, 701900, 715500, 728600}, {749150, 764800, 779800, 794400}, {811170, 828400, 844900, 860900}, {873810, 892600, 910700, 928200}, {937050, 957500, 977200, 996200}, {1000880, 1023030, 1044300, 1064900}, {1065280, 1089140, 1112100, 1134200}, {1130230, 1155840, 1180500, 1204200}, {1195732, 1223110, 1249400, 1274700}, {1261776, 1290950, 1319000, 1345900}, {1328360, 1359340, 1389100, 1417600}, {1395480, 1428280, 1459800, 1489900}, {1463150, 1497780, 1531000, 1562700}, {1531370, 1567840, 1602800, 1636100}, {1600150, 1638450, 1675100, 1709900}, {1669500, 1709640, 1748000, 1784300}, {1739440, 1781410, 1821470, 1859300}, {1809990, 1853780, 1895520, 1934800}, {1881170, 1926775, 1970170, 2010800}, {1953010, 2000415, 2045440, 2087400}, {2025350, 2074734, 2121370, 2164700}, {2098780, 2149770, 2197990, 2242600}, {2172790, 2225550, 2275360, 2321300}, {2247600, 2302150, 2353530, 2400900}, {2323300, 2379610, 2432580, 2481410}, {2399800, 2458000, 2512590, 2563090}, {2477400, 2537390, 2593670, 2646080}, {2555900, 2617870, 2675913, 2730600}, {2635600, 2699530, 2759475, 2816930}, {2716400, 2782480, 2844507, 2905330}, {2798500, 2866840, 2931190, 2996160}, {2882000, 2952760, 3019730, 3089760}, {2966900, 3040400, 3110350, 3186490}, {3053300, 3129800, 3203300, 3286750}, {3141500, 3221300, 3298850, 3390878}, {3231500, 3315100, 3397300, 3499231}, {3323300, 3411300, 3498950, 3612110}, {3417300, 3510100, 3604120, 3727990}, {3513500, 3611800, 3713130, 3852480}, {3612200, 3716700, 3826300, 3980370}, {3713300, 3824900, 3943900, 4113380}, {3817300, 3936800, 4066200, 4252220}, {3924100, 4052500, 4193500, 4396340}}" />
  </table>

```

Σχήμα 4.3: Πίνακας του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS για τον υπολογισμό της ειδικής ενθαλπίας του αέρα και του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) υποθέτοντας πλήρης χημική διάσταση στις 50atm.

Επίσης οφείλουμε να τονίσουμε ότι παρόλο που η μεταβολή της πλειοψηφίας των ιδιοτήτων του ρευστού με τη θερμοκρασία είναι αρκετά μακριά από το να χαρακτηριστεί γραμμική, το διάστημα παρεμβολής των 50K είναι αρκετά μικρό για να ελαχιστοποιηθούν τα λάθη αυτά σ' ένα αποδεκτό επίπεδο. Παρόλα αυτά είναι απαραίτητη η γραμμική παρεμβολή με βάση τον φυσικό λογάριθμο της θερμοκρασίας για τη συνάρτηση εντροπίας ειδάλλως παρουσιάζονται προβλήματα σύγκλισης κοντά στην ηχητική περιοχή όπου $Mach=1$ [20].

Τέλος πρέπει να αναφέρουμε ότι προς το παρόν το PROOSIS περιλαμβάνει μονάχα πίνακες με τις ιδιότητες του καυσαερίου που έχει προκύψει από την καύση του Jet-A. Στην επόμενη ενότητα περιγράφεται η διαδικασία με την οποία επεκτάθηκε το PROOSIS και με το CEA δημιουργήθηκαν πίνακες του εργαζόμενου μέσου από την καύση διαφόρων συμβατικών και εναλλακτικών καυσίμων.

4.3 Δημιουργία μοντέλου εργαζόμενου μέσου για το PROOSIS μέσω του NASA CEA

Με το λογισμικό της NASA μας δίνεται η δυνατότητα να υπολογίσουμε τα θερμοδυναμικά χαρακτηριστικά $[h, S, M(4.3)$ και $\gamma]$ και τη δυναμική συνεκτικότητα μ (calculate thermal transport properties) του αέρα και του καυσαερίου που παράγεται από τη καύση οποιουδήποτε καυσίμου με οποιοδήποτε οξειδωτικό:

- για διάφορους λόγους οξειδωτικού-καυσίμου o/f , ο οποίος είναι ο αντίστροφος του λόγου καυσίμου-οξειδωτικού FAR όπου $FAR = 0, 0.02, 0.04, 0.06$ κτλ. Εδώ υπήρξε το πρόβλημα της διαίρεσης με το 0 το οποίο αντιμετωπίστηκε θέτοντας το λόγο o/f μια πολύ μεγάλη τιμή (10^9) στην οποία παρατηρήθηκε μηδενική περιεκτικότητα του ολικού αντιδρώντος σε καύσιμο.
- για διάφορες θερμοκρασίες και πιέσεις των προϊόντων της καύσης κάτι που αντιστοιχεί στην επίλυση τριών προβλημάτων. Συγκεκριμένα οι θερμοκρασίες που λήφθηκαν υπόψη για όλες τις περιπτώσεις είναι 200÷3000K με βήμα 50K ενώ οι πιέσεις λήφθηκαν ως εξής:
 - 1bar για το no dissociation model. Η επιλογή αυτή αν και αυθαίρετη δεν επηρεάζει τους υπολογισμούς μας καθώς η σύσταση του καυσαερίου είναι ανεξάρτητη της πίεσης σ' αυτή την περίπτωση.

- ο 50atm για το dissociation model. Ωστόσο θα μπορούσαμε να επιλέξουμε όποια πίεση θέλουμε και να παράγουμε πίνακες για κάθε πίεση.
- λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της χημικής διάστασης ή υποθέτοντας σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης

Αυτό γίνεται με την καρτέλα only όπου στην περίπτωση που κάνουμε υπολογισμούς για το no dissociation μοντέλο δεν αφήνουμε κανένα περιθώριο για διάσταση των προϊόντων και λαμβάνουμε υπόψη σαν πιθανά προϊόντα μόνο τα Ar, CO₂, H₂O, N₂ και O₂ καθώς έχουμε συνήθως υποστοιχειομετρικές συνθήκες καύσης (φτωχή καύση) στους αεριοστρόβιλους.

Αντίθετα στην περίπτωση του dissociation μοντέλου δεν κάνουμε κάποια ενέργεια στην καρτέλα αυτή παρά μόνο στην καρτέλα omit όπου δίνουμε εντολή στο πρόγραμμα να παραλείψει να εισάγει στους υπολογισμούς σαν πιθανά προϊόντα τα συμπυκνωμένα στοιχεία π.χ. H₂O(L) γιατί στις χαμηλές θερμοκρασίες παρατηρήθηκαν προβλήματα σύγκλισης του κώδικα. Αυτό δεν επηρεάζει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων μας [20].

- για κάθε WAR, αφού από τη σχέση

$$X_v = \text{WAR} / (1 + \text{WAR}) \quad (4.5)$$

υπολογίζουμε την κατά μάζα περιεκτικότητα του υγρού αέρα σε υδρατμό καθώς και σε ξηρό αέρα και καθορίζουμε έτσι το μείγμα του οξειδωτικού. Έτσι για WAR=0.10 η κατά μάζα περιεκτικότητα (rel. wt.) του υγρού αέρα σε υδρατμό προκύπτει 0.091 από τη σχέση (4.5) και σε ξηρό αέρα προκύπτει 1-0.091 = 0.909. Σ' αυτή δηλαδή την περίπτωση έχουμε ένα μείγμα οξειδωτικού με κατά μάζα σύσταση 0.091 σε H₂O και 0.909 σε ξηρό αέρα (σχήμα 3.2).

Για WAR=0 έχουμε για οξειδωτικό μόνο τον ξηρό αέρα.

Από το CEA ζητάμε να μας βγάλει τα παραπάνω αποτελέσματα σε plt αρχεία τα οποία μπορούν εύκολα να επεξεργαστούν περαιτέρω από διάφορα προγράμματα (MS Excel, Fortran κλπ.).

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο το CEA μας δίνει τη δυνατότητα μέσω της εφαρμογής CEA_GUI να δημιουργήσουμε γραφικά το αρχείο εισόδου που

χρειάζεται το πρόγραμμα για να κάνει μοντελοποίηση της καύσης και στη συνέχεια να ζητήσουμε μέσω της εντολής Execute CEA2 να ξεκινήσουν οι υπολογισμοί. Ο τρόπος αυτός αν και είναι ιδιαίτερα εύκολος (συστήνεται ιδιαίτερα στους χρήστες που χρησιμοποιούν για πρώτη φορά το CEA) έχει σαν βασικό μειονέκτημα ότι ο αριθμός των προβλημάτων μου μπορεί ταυτόχρονα να επιλυθεί από το λογισμικό της NASA είναι αρκετά περιορισμένος.

Μια άλλη μέθοδος για να κάνουμε τους υπολογισμούς που θέλουμε με το CEA είναι να δημιουργήσουμε μόνοι μας το αρχείο εισόδου του προγράμματος (κάτι το οποίο είναι εξίσου εύκολο για κάποιον που έχει εξοικειωθεί ελάχιστα με το πρόγραμμα) και στη συνέχεια να τρέξουμε το αρχείο FCEA2 το οποίο είναι μια εκτελέσιμη έκδοση του CEA σε Fortran χωρίς γραφικό περιβάλλον χρήστη (GUI). Με τον τρόπο αυτό αυξάνεται σημαντικά ο αριθμός των προβλημάτων που μπορούν να επιλυθούν ταυτόχρονα από το CEA.

Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι για το tr πρόβλημα η εφαρμογή CEA_GUI επιτρέπει στο χρήστη να εισάγει το μέγιστο 16 θερμοκρασίες ανά μοντελοποίηση, τη στιγμή που θα κάνουμε επίλυση για 57 θερμοκρασίες (τόσες είναι οι θερμοκρασίες που περιλαμβάνει το διάστημα 200-3000K με βήμα 50K). Από την άλλη μεριά με το FCEA2, το αρχείο εισόδου μπορεί να περιέχει μέχρι και 50 θερμοκρασίες για κάθε μοντελοποίηση που γίνεται με το CEA. Επομένως είναι σαφές το πλεονέκτημα της 2^{ης} μεθόδου ως προς την ταχύτητα με την οποία γίνονται οι υπολογισμοί και αυτός ο τρόπος χρησιμοποιείται στη συνέχεια για την παραγωγή των πινάκων που περιέχουν τις ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου.

Έτσι λοιπόν η παραπάνω ανάλυση εφαρμόστηκε:

Για τα καύσιμα **Jet-A(g)**, **Jet-A(L)**, **JP-4**, **JP-5**, **H₂**, **CH₄**, **Τυπικό Φυσικό Αέριο** και **Diesel(g)**:

- Τα Jet-A(g), Jet-A(L), JP-4, JP-5, H₂ και CH₄ βρίσκονται στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA όπως φαίνεται στο παράρτημα Π.1
- Το τυπικό Φυσικό αέριο έχει τη σύσταση η οποία φαίνεται στο σχήμα 4.4. Τα επιμέρους συστατικά βρίσκονται και αυτά στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA και επομένως αρκεί να καθορίσουμε την κατά μάζα αναλογία τους στο ολικό καύσιμο.

- Το Diesel(g) δεν βρίσκεται στη βιβλιοθήκη του CEA και απλά χρειάζεται να καθορίσουμε το όνομα και τον μοριακό του τύπο $C_{12.9}H_{23.22}$ [20]. Κανένα άλλο δεδομένο για το «άγνωστο» καύσιμο δεν χρειάζεται καθώς επιλύουμε τp προβλήματα.

Συμπληρώνοντας μπορούμε να πούμε ότι η δημιουργία πινάκων με τις ιδιότητες του αέρα και του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση καυσίμων μπορεί να επεκταθεί και σε άλλα καύσιμα είτε αυτά βρίσκονται στη βιβλιοθήκη του CEA είτε όχι π.χ. στο επόμενο κεφάλαιο θα δημιουργήσουμε πίνακες εργαζόμενου μέσου με καυσαέρια που προέρχονται από την καύση βιοκαυσίμων τα οποία προσφέρουν μεγάλες προοπτικές για εφαρμογή στους αεριοστρόβιλους.

<u>Constituent</u>	<u>Chemical Formula</u>	<u>Mole Fractions</u>	<u>rt weight</u>
Methane	CH ₄	0.9021	0,8127
Ethane	C ₂ H ₆	0.0445	0,0751
Propane	C ₃ H ₈	0.0052	0,0129
I-Butane	C ₄ H _{10,i}	0.001	0,0033
N-Butane	C ₄ H _{10,n}	0.001	0,0033
I-Pentane	C ₅ H _{12,i}	0.0004	0,0016
N-Pentane	C ₅ H _{12,n}	0.0004	0,0016
Hexane	C ₆ H ₁₄	0.0005	0,0024
Nitrogen	N ₂	0.0266	0,0418
Carbon Dioxide	CO ₂	0.0183	0,0452

Σχήμα 4.4: Σύσταση κατά mole και κατά μάζα του τυπικού φυσικού αερίου [20].

Για κάθε καύσιμο η ανάλυση εφαρμόστηκε τόσο για το μοντέλο της πλήρης διάστασης στις 50atm (dissociation model) όσο και για το μοντέλο που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης (no dissociation model).

Για κάθε μοντέλο καύσης και για τους δύο λόγους νερού-αέρα στο οξειδωτικό WAR=0.00 & 0.10.

Για κάθε λόγο WAR και για τις 57 θερμοκρασίες του διαστήματος 200-3000K. Είναι σαφές ότι παρότι επιλέχθηκε η μέθοδος εκτέλεσης των υπολογισμών με το FCEA2 είναι αναγκαίο να δημιουργηθούν δύο αρχεία εισόδου με το κάθε αρχείο να περιλαμβάνει τις μισές περίπου θερμοκρασίες. Επίσης για κάθε WAR δημιουργήθηκε και ένα τρίτο αρχείο το οποίο υπολογίζει την ενθαλπία σχηματισμού του εργαζόμενου

μέσου στις 298.15K (θερμοκρασία αναφοράς) για κάθε FAR, για λόγους που θ' αναλυθούν παρακάτω.

Για καθεμία από τις παραπάνω θερμοκρασίες για 4 λόγους καυσίμου-αέρα (FAR) οι οποίοι δεν ήταν κοινοί για όλα τα καύσιμα. Πιο αναλυτικά:

- Για τα Jet-A(g), Jet(L), JP-4, JP-5 και Diesel(g) οι υπολογισμοί έγιναν για FAR = 0.00, 0.02, 0.04, 0.06.
- Για το H₂ για FAR = 0.00, 0.01, 0.02, 0.025.
- Για το CH₄ και για το τυπικό φυσικό αέριο για FAR = 0.00, 0.01, 0.02, 0.04.

Θα μπορούσαμε να αναπαράγουμε τους πίνακες για μεγαλύτερους λόγους FAR κοντά στο στοιχειομετρικό π.χ. για το Jet-A(g) FAR_{stoich} = 0.06817 [20]. Ωστόσο κάτι τέτοιο δεν έγινε καθώς παρουσιάζονταν προβλήματα σύγκλισης στους υπολογισμούς που είχαν να κάνουν με το no dissociation μοντέλο λόγω των περιορισμένων ειδών που λαμβάνονταν υπόψη για πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία. Έτσι για λόγους σύγκρισης των δύο μοντέλων οι υπολογισμοί έγιναν για τα ίδια FAR που περιγράφονται παραπάνω.

Ενδεικτικά στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αρχεία εισόδου του προγράμματος για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του αέρα [$\rho/f=10^9$] και:

- του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με τον υγρό αέρα (WAR=0.1) με το μοντέλο που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης για θερμοκρασίες 200-1600K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06 (σχήμα 4.5)
- του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το ξηρό αέρα με το μοντέλο της πλήρης χημικής διάστασης στις 50atm για θερμοκρασίες 1650-3000K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06 (σχήμα 4.6)

Επίσης στο σχήμα 4.7 παρουσιάζεται το αρχείο αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση [dry_diss_2.plt] που προκύπτει από το παραπάνω αρχείου εισόδου [dry_diss_2.inp].

```
wet_nodiss_1.inp - Notepad
File Edit Format View Help
problem case=wet_nodiss o/f=1000000000,50,25,16.67,
tp t,k=200,250,300,350,400,450,500,550,600,650,700,750,800,850,900,950,
1000,1050,1100,1150,1200,1250,1300,1350,1400,1450,1500,1550,1600,
p,bar=1,
react
fuel=Jet-A(g) wt=1. t,k=298.15
oxid=Air wt=.909 t,k=298.15
oxid=H2O wt=.091 t,k=298.15
only
Ar CO2 H2O N2 O2
output transport
plot o/f t h s gam mw vis
end
```

Σχήμα 4.5: Αρχείο εισόδου για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με τον υγρό αέρα για το no dissociation μοντέλο για θερμοκρασίες 200-1600K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06.

```
dry_diss_2.inp - Notepad
File Edit Format View Help
problem case=dry_diss o/f=1000000000,50,25,16.67,
tp t,k=1650,1700,1750,1800,1850,1900,
1950,2000,2050,2100,2150,2200,2250,2300,2350,2400,2450,
2500,2550,2600,2650,2700,2750,2800,2850,2900,2950,3000,
p,atm=50,
react
fuel=Jet-A(g) wt=1. t,k=298.15
oxid=Air wt=1. t,k=298.15
omit
c(gr) H2o(cr) H2o(L)
output transport
plot o/f t h s gam mw vis
end
```

Σχήμα 4.6: Αρχείο εισόδου για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το ξηρό αέρα για το dissociation μοντέλο για θερμοκρασίες 200-1600K και FAR = 0.00, 0.02, 0.04 και 0.06.

```
dry_diss_2.plt - Notepad
File Edit Format View Help
# o/f t h s gam mw vis
1.0000E+06 1.6500E+03 1.5237E+03 7.6086E+00 1.2964E+00 2.8966E+01 6.1065E-01
1.0000E+06 1.7000E+03 1.5867E+03 7.6462E+00 1.2938E+00 2.8966E+01 6.2306E-01
1.0000E+06 1.7500E+03 1.6501E+03 7.6830E+00 1.2912E+00 2.8966E+01 6.3538E-01
1.0000E+06 1.8000E+03 1.7139E+03 7.7189E+00 1.2886E+00 2.8966E+01 6.4762E-01
1.0000E+06 1.8500E+03 1.7782E+03 7.7542E+00 1.2861E+00 2.8966E+01 6.5976E-01
1.0000E+06 1.9000E+03 1.8430E+03 7.7887E+00 1.2835E+00 2.8966E+01 6.7183E-01
1.0000E+06 1.9500E+03 1.9081E+03 7.8226E+00 1.2810E+00 2.8966E+01 6.8382E-01
1.0000E+06 2.0000E+03 1.9738E+03 7.8558E+00 1.2785E+00 2.8966E+01 6.9574E-01
1.0000E+06 2.0500E+03 2.0399E+03 7.8885E+00 1.2761E+00 2.8966E+01 7.0758E-01
1.0000E+06 2.1000E+03 2.1066E+03 7.9206E+00 1.2736E+00 2.8965E+01 7.1936E-01
1.0000E+06 2.1500E+03 2.1737E+03 7.9522E+00 1.2711E+00 2.8965E+01 7.3107E-01
1.0000E+06 2.2000E+03 2.2413E+03 7.9833E+00 1.2687E+00 2.8964E+01 7.4272E-01
1.0000E+06 2.2500E+03 2.3095E+03 8.0139E+00 1.2662E+00 2.8963E+01 7.5431E-01
1.0000E+06 2.3000E+03 2.3782E+03 8.0441E+00 1.2638E+00 2.8962E+01 7.6584E-01
1.0000E+06 2.3500E+03 2.4475E+03 8.0739E+00 1.2613E+00 2.8961E+01 7.7732E-01
1.0000E+06 2.4000E+03 2.5174E+03 8.1034E+00 1.2588E+00 2.8959E+01 7.8875E-01
1.0000E+06 2.4500E+03 2.5880E+03 8.1325E+00 1.2562E+00 2.8957E+01 8.0013E-01
1.0000E+06 2.5000E+03 2.6593E+03 8.1613E+00 1.2537E+00 2.8954E+01 8.1147E-01
1.0000E+06 2.5500E+03 2.7313E+03 8.1898E+00 1.2511E+00 2.8951E+01 8.2276E-01
1.0000E+06 2.6000E+03 2.8041E+03 8.2181E+00 1.2485E+00 2.8946E+01 8.3401E-01
1.0000E+06 2.6500E+03 2.8778E+03 8.2461E+00 1.2459E+00 2.8941E+01 8.4523E-01
1.0000E+06 2.7000E+03 2.9523E+03 8.2740E+00 1.2432E+00 2.8935E+01 8.5641E-01
1.0000E+06 2.7500E+03 3.0279E+03 8.3017E+00 1.2406E+00 2.8928E+01 8.6757E-01
1.0000E+06 2.8000E+03 3.1045E+03 8.3293E+00 1.2379E+00 2.8919E+01 8.7870E-01
1.0000E+06 2.8500E+03 3.1822E+03 8.3568E+00 1.2352E+00 2.8909E+01 8.8982E-01
1.0000E+06 2.9000E+03 3.2612E+03 8.3843E+00 1.2325E+00 2.8898E+01 9.0091E-01
1.0000E+06 2.9500E+03 3.3415E+03 8.4118E+00 1.2298E+00 2.8884E+01 9.1200E-01
1.0000E+06 3.0000E+03 3.4232E+03 8.4392E+00 1.2271E+00 2.8869E+01 9.2308E-01
5.0000E+01 1.6500E+03 6.9161E+02 7.7213E+00 1.2833E+00 2.8968E+01 6.1061E-01
5.0000E+01 1.7000E+03 7.5687E+02 7.7603E+00 1.2808E+00 2.8968E+01 6.2302E-01
5.0000E+01 1.7500E+03 8.2260E+02 7.7984E+00 1.2782E+00 2.8967E+01 6.3534E-01
5.0000E+01 1.8000E+03 8.8881E+02 7.8357E+00 1.2757E+00 2.8967E+01 6.4757E-01
5.0000E+01 1.8500E+03 9.5552E+02 7.8723E+00 1.2732E+00 2.8967E+01 6.5971E-01
5.0000E+01 1.9000E+03 1.0227E+03 7.9081E+00 1.2706E+00 2.8966E+01 6.7176E-01
5.0000E+01 1.9500E+03 1.0905E+03 7.9433E+00 1.2681E+00 2.8965E+01 6.8374E-01
```

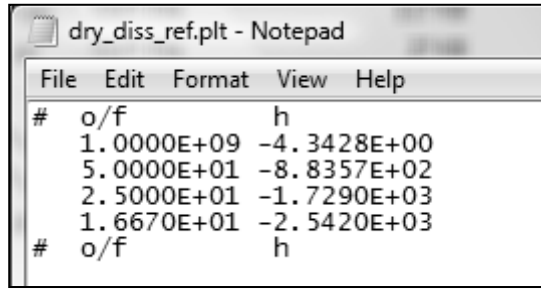
Σχήμα 4.7: Αρχείο αποτελεσμάτων για γραφική απεικόνιση [dry_diss_2.plt].

Στη συνέχεια τα αποτελέσματα αυτά επεξεργάζονται από προγράμματα γραμμένα σε Fortran (metatroph_xml.for ή metatroph_xml_2.for) προκειμένου να γίνουν οι κατάλληλες μετατροπές και πράξεις στους αριθμούς και να γίνει η εγγραφή τους σε xml πίνακες που είναι συμβατοί με το PROOSIS. Συγκεκριμένα με τους κώδικες αυτούς:

- Διαβάζονται τα δεδομένα από τα αρχεία αποτελεσμάτων plt του CEA.
- Γίνονται οι κατάλληλες μετατροπές στα μεγέθη (h, S, γ , M & μ) που διαβάζονται από τα plt αρχεία:
 - Ο ισηντροπικός εκθέτης γ δεν υφίσταται καμία μεταβολή.
 - Οι τιμές της δυναμικής συνεκτικότητας μ πολλαπλασιάζονται με το δέκα προκειμένου να γίνει μετατροπή των μονάδων από milli-Poise (mP) του CEA σε Pascal*sec ($N*sec/m^2$).
 - Η σταθερά του αερίου για κάθε περίπτωση προκύπτει από τη σχέση (4.3) με γνωστό το μοριακό βάρος M.
 - Η τελική τιμή της ενθαλπίας h προκύπτει σαν τη διαφορά της ειδικής ενθαλπίας του εργαζόμενου μέσου στη θερμοκρασία T (200-3000K) που υπολογίζεται από το CEA και της ενθαλπίας σχηματισμού στην κατάσταση αναφοράς του CEA δηλαδή σε θερμοκρασία $T_{ref} = 298.15K$ και πίεση $P_{ref} = 1bar$. Αυτό μπορεί να γίνει καθώς εκείνο που μας ενδιαφέρει στους υπολογισμούς των αεριοστρόβιλων είναι η διαφορά των ενθαλπιών μεταξύ δύο καταστάσεων η οποία δεν εξαρτάται από την επιλογή της T_{ref} [21]:

$$(4.1) \rightarrow h(T_2) - h(T_1) = \int_{T_{ref}}^{T_2} Cp(T)dT - \int_{T_{ref}}^{T_1} Cp(T)dT = \int_{T_1}^{T_2} Cp(T)dT \quad (4.6)$$

Για το λόγο αυτό δημιουργήθηκε και ένα επιπλέον αρχείο αποτελεσμάτων plt (σχήμα 4.8) για κάθε καύσιμο, για κάθε μοντέλο και για κάθε λόγο WAR το οποίο υπολογίζει την ενθαλπία του εργαζόμενου μέσου στους 298.15K και 1bar για κάθε FAR.



```

dry_diss_ref.plt - Notepad
File Edit Format View Help
# o/f h
1.0000E+09 -4.3428E+00
5.0000E+01 -8.8357E+02
2.5000E+01 -1.7290E+03
1.6670E+01 -2.5420E+03
# o/f h
    
```

Σχήμα 4.8: Αρχείο αποτελεσμάτων plt με τις ενθαλπίες σχηματισμού του εργαζόμενου μέσου στους 298.15K για κάθε FAR.

- ο Η συνάρτηση εντροπίας φ δεν υφίσταται καμία μεταβολή και ισούται με την τιμή της εντροπίας S που υπολογίζεται από το CEA. Με το ίδιο σκεπτικό όπως και με την ενθαλπία, εκείνο που μας ενδιαφέρει στους υπολογισμούς των αεριοστρόβιλων είναι η διαφορά της συνάρτησης εντροπίας μεταξύ δύο καταστάσεων η οποία δεν εξαρτάται από την επιλογή της T_{ref} [21]:

$$(4.2) \rightarrow \varphi(T_2, P_j) - \varphi(T_1, P_j) = \int_{T_{ref}}^{T_2} \frac{c_p}{T} dT - \int_{T_{ref}}^{T_1} \frac{c_p}{T} dT = \int_{T_1}^{T_2} \frac{c_p}{T} dT = S(T_2, P_j) - S(T_1, P_j) \quad (4.7)$$

με $j=nd$, d όπου $P_{nd}=1bar$ για το no dissociation model και $P_d = 50atm$ για το dissociation model. Οι όροι $S(T_{ref}, P_{ref})$ και $R \cdot \ln(P_j/P_{ref})$, απαλείφονται όταν λαμβάνονται υπόψη οι διαφορές της συνάρτησης εντροπίας.

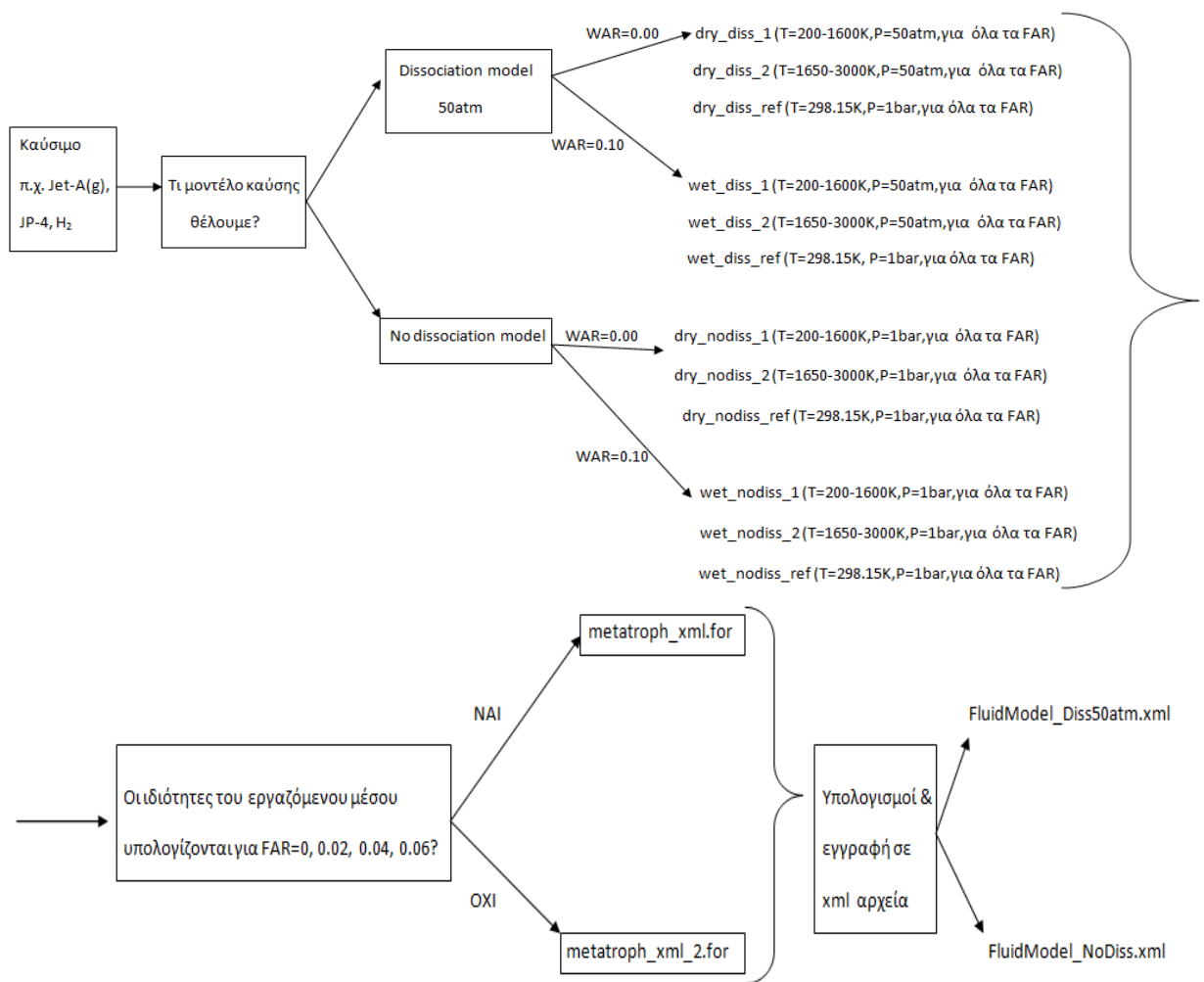
Εκείνο πάντως που πρέπει να κρατήσουμε από τα παραπάνω και που έχει σημασία στους υπολογισμούς σχετικά με τη λειτουργία και την απόδοση των αεριοστρόβιλων είναι η διαφορά της ενθαλπίας και της συνάρτησης εντροπίας και ΟΧΙ οι απόλυτες τιμές.

- Τέλος γίνεται η εγγραφή των δεδομένων σε αρχεία xml, είτε για το dissociation model είτε για το no dissociation model είτε και για τα δύο μοντέλα, με τη κατάλληλη μορφή και αλληλουχία.

Με τον πρώτο κώδικα `metatroph_xml.for` παράγονται οι πίνακες για τα καυσαέρια των οποίων οι ιδιότητες υπολογίζονται απαραίτητα για τους λόγους FAR = 0.00, 0.02, 0.04 & 0.06 π.χ. τα καυσαέρια που προέρχονται από τα καύσιμα Jet-A(g), Jet-A(L), JP-4, JP-5 και Diesel(g).

Με τον δεύτερο κώδικα `metatroph_xml_2.for` παράγονται οι πίνακες των καυσαερίων που προέρχονται κυρίως από την καύση αερίων καυσίμων και για διαφορετικούς λόγους FAR από την 1^η περίπτωση. Οι λόγοι αυτοί διαβάζονται απευθείας από τα `plt` αρχεία με ακρίβεια τριών δεκαδικών ψηφίων π.χ. καυσαέρια από την καύση του υδρογόνου (FAR = 0.00, 0.01, 0.02 & 0.025), του μεθανίου και του τυπικού φυσικό αέριο (FAR = 0.00, 0.01, 0.02 & 0.04).

Και στις δύο περιπτώσεις οι υπολογισμοί γίνονται απαραίτητα για τέσσερις λόγους καυσίμου-οξειδωτικού FAR. Οι δύο αυτοί κώδικες γραμμένοι σε Fortran βρίσκονται στο παράρτημα Π.3 της εργασίας. Επίσης στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται σχηματικά η διαδικασία που περιγράφηκε παραπάνω για τη δημιουργία μοντέλων εργαζόμενου μέσου για διάφορα καύσιμα.



Σχήμα 4.9 : Διαδικασία δημιουργίας μοντέλων εργαζόμενου μέσου.

4.4 Επίδραση ακρίβειας μοντέλου εργαζόμενου μέσου σε επίπεδο μηχανής

Με τη διαδικασία που αναπτύχθηκε στην προηγούμενη ενότητα έγινε εφικτή η δημιουργία πινάκων με τις ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου για δύο μοντέλα καύσης (dissociation στις 50atm και no dissociation) και για διάφορα καύσιμα (Jet-A(g), Φυσικό αέριο, Υδρογόνο κλπ.) χρησιμοποιώντας το λογισμικό χημικής ισορροπίας CEA και κάποιους κώδικες γραμμένους στη Fortran. Το γεγονός αυτό μας δίνει τη δυνατότητα να μελετήσουμε στη συνέχεια στο PROOSIS την επίδραση που έχουν παράμετροι όπως η χημική διάσταση του εργαζόμενου μέσου καθώς και η σύνθεση του καυσίμου σε βασικές παραμέτρους της μηχανής (T_{t4} , sfc, thrust κλπ.).

Η παραπάνω ανάλυση έγινε για δύο περιπτώσεις μηχανών:

- CFM56 ο οποίος είναι ένας κινητήρα διπλού ρεύματος, διπλού τυμπάνου, χωρίς ανάμειξη και χρησιμοποιείται ευρέως σε πολιτικά αεροσκάφη (κυρίως Boeing).
- GTAC (Geared Turbofan Active Core) ο οποίος είναι ένας κινητήρας προηγμένης τεχνολογίας διπλού ρεύματος, διπλού τυμπάνου, χωρίς ανάμειξη και με ενδιάμεση ψύξη και επομένως υψηλότερων πιέσεων και θερμοκρασιών από τον CFM56. Μεταξύ του ανεμιστήρα και του συστήματος συμπίεστη χαμηλής πίεσεως – στροβίλου χαμηλής πίεσεως παρεμβάλεται ένας μειωτήρας στροφών ο οποίος επιτρέπει στο συμπίεστη και στο στρόβιλο να λειτουργούν με την ονομαστική τους ταχύτητα προς όφελος της απόδοσης και του θορύβου. Επίσης η εισαγωγή τεχνολογιών ενεργού πυρήνα, όπως η ενδιάμεση ψύξη, φέρνουν περαιτέρω βελτιώσεις επιτρέποντας στην μηχανή να ρυθμίζεται για βέλτιστη απόδοση και ασφάλεια σε επίπεδο συνιστώσας ή μηχανής σύμφωνα με τις πραγματικές συνθήκες λειτουργίας της ή με βάση την κατάσταση της «υγείας» της συνιστώσας ή μηχανής. Οι κινητήρες αυτοί αποτελούν τη σύγχρονη τάση για εφαρμογή στα αεροσκάφη όπως τονίζεται και στο επόμενο κεφάλαιο.

Λόγω περιορισμών που είχαν να κάνουν με τη διάθεση του PROOSIS, οι υπολογισμοί που ακολουθούν έγιναν σε τρεις πλατφόρμες (deck) του PROOSIS και όχι στο πρόγραμμα καθεαυτό. Το γεγονός αυτό βέβαια δεν επηρεάζει σε κανένα βαθμό την ακρίβεια των αποτελεσμάτων μας.

Η κατώτερη θερμογόνος δύναμη για κάθε καύσιμο που μας ζητείται από το PROOSIS πρόκυψε με τη βοήθεια του κώδικα thermogonos_dinami.for λαμβάνοντας τον μοριακό τύπο και την ενθαλπία σχηματισμού (απόλυτη ενθαλπία στους 298.15K) του καθενός από τη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA, αρχείο thermo.lib. Έτσι έχουμε:

Καύσιμο	Μοριακός τύπος	Ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15K (J/mol)	Κατώτερη θερμογόνος δύναμη (J/Kg) στους 298.15K
Jet-A(g)	C ₁₂ H ₂₃	-249657	43.353.164
Jet-A(L)	C ₁₂ H ₂₃	-303403	43.031.930
JP-4	CH _{1.9423}	-22723	43.357.534
JP-5	CH _{1.9185}	-22183	43.264.477
Μεθάνιο	CH ₄	-74600	50.027.366
Υδρογόνο	H ₂	0	119.960.512

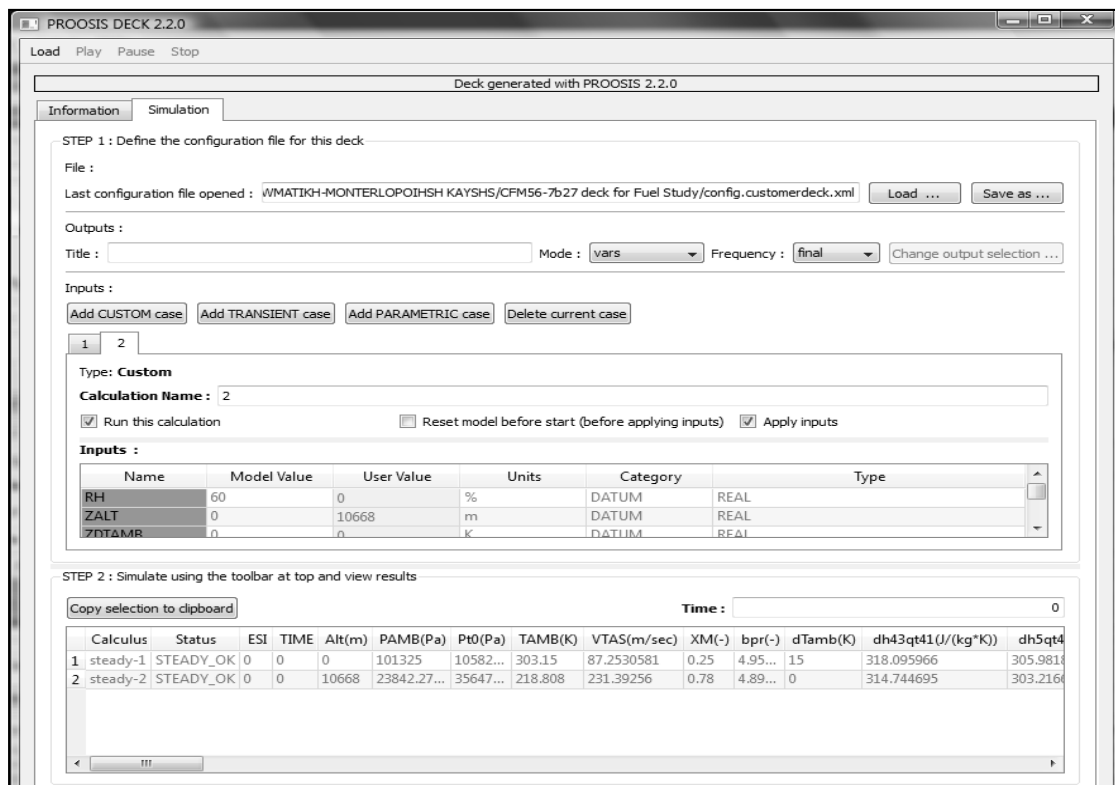
Πίνακας 4.1: Κατώτερη θερμογόνος δύναμη για διάφορα καύσιμα.

Για το Diesel(g) λήφθηκε **LHV = 43.500.000 J/Kg** [19] ενώ για το τυπικό Φυσικό αέριο **LHV = 47.250.000 J/Kg** με βάση στοιχείων της ΔΕΠΑ [22] για το αλγερινό φυσικό αέριο που έχει παρόμοια σύσταση.

Έχοντας στο ίδιο φάκελο με το deck και το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου που θέλουμε να εξετάσουμε και δίνοντάς του το όνομα CEA.xml είμαστε σε θέση να πραγματοποιήσουμε την προσομοίωση που θέλουμε.

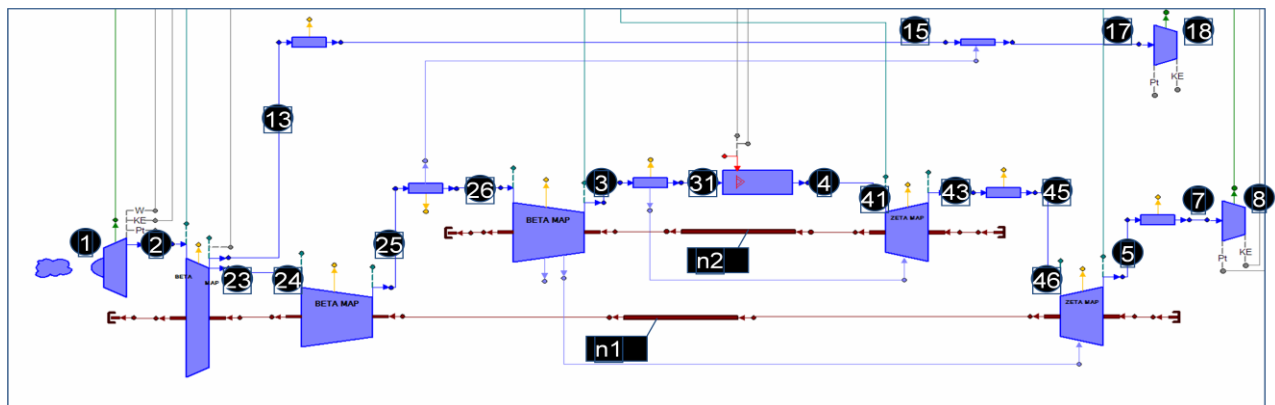
4.4.1 Μελέτη 1^η : CFM56

Το deck που χρησιμοποιήθηκε έχει το όνομα CFM56-7b27 deck for Fuel Study για μελέτη της μηχανής εκτός σχεδίασης δηλαδή η μηχανή είναι ήδη σχεδιασμένη και απλά μεταβάλλουμε το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου και ελέγχουμε τις επιδόσεις της. Το γραφικό του περιβάλλον φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 4.10: Γραφικό περιβάλλον CFM56-7b27 deck for Fuel Study.

Το μοντέλο και η αρίθμηση των θέσεων του κινητήρα CFM56 στο PROOSIS φαίνονται στο ακόλουθο σχήμα:



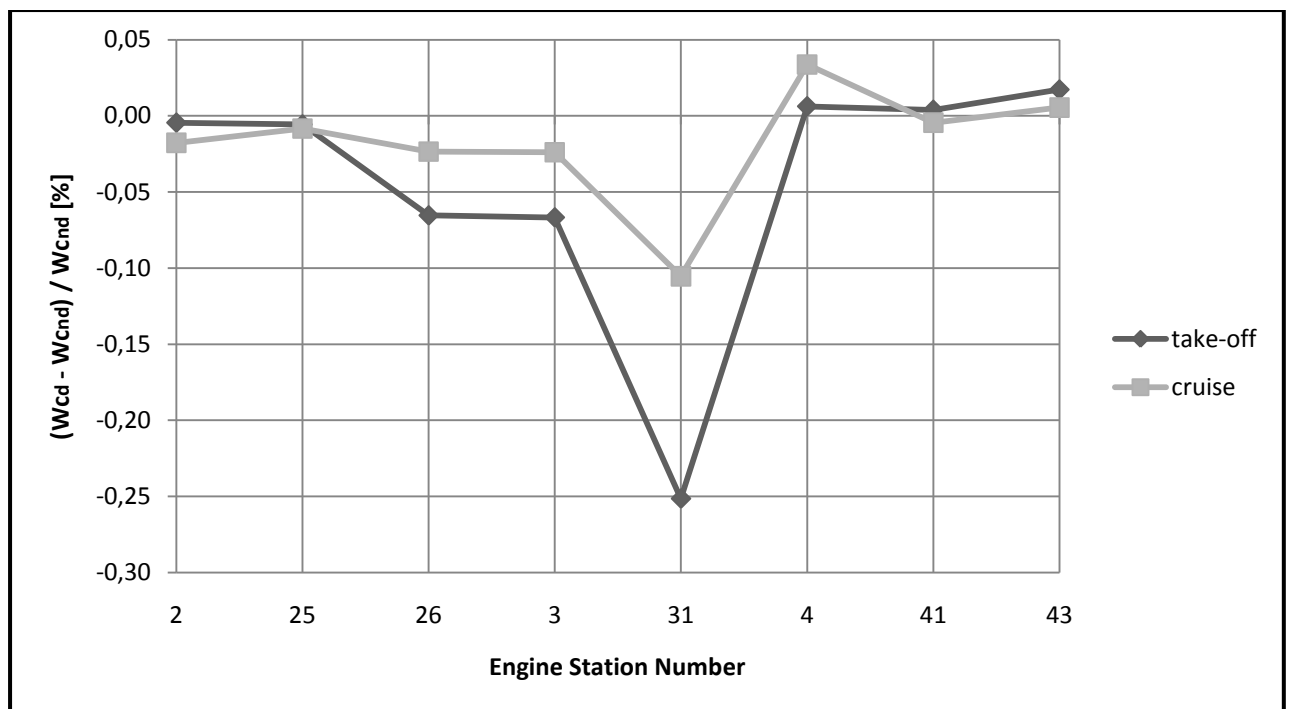
Σχήμα 4.11: Μοντέλο κινητήρα CFM56 στο PROOSIS.

Επίδραση χημικής διάστασης σε ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου σε διάφορες θέσεις της μηχανής

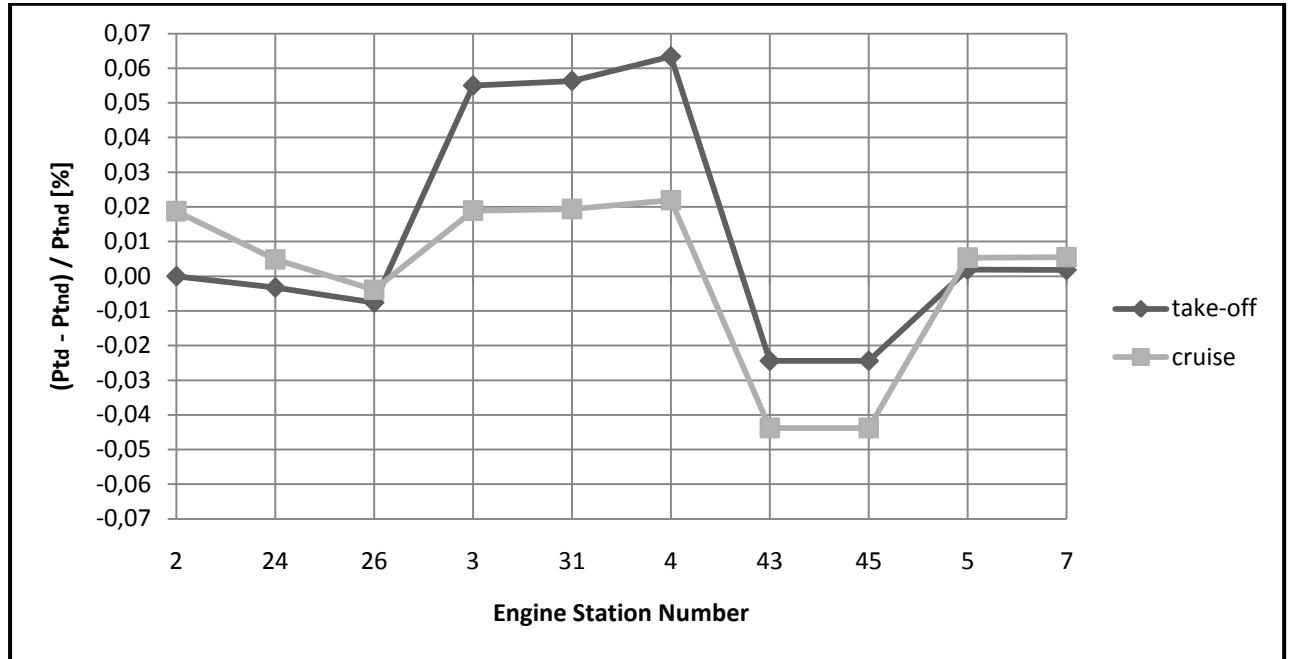
Οι πρώτοι υπολογισμοί που έγιναν είχαν σκοπό να δείξουν τη διαφορά ανάμεσα στο dissociation & no dissociation model και την επίδραση που έχουμε σε παραμέτρους όπως η θερμοκρασία, η πίεση και η παροχή μάζας ρευστού σε διάφορες θέσεις της μηχανής. Οι υπολογισμοί αυτοί έγιναν για καύσιμο Jet-A(g) για δύο σημεία μελέτης της μηχανής, εκτός σχεδίασης:

- **Take-off:** Mach = 0.25, Ύψος = 0m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 15K, Ωση= 96kN.
- **Cruise:** Mach = 0.78, Ύψος = 10668m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 0K, Ωση= 24.5kN.

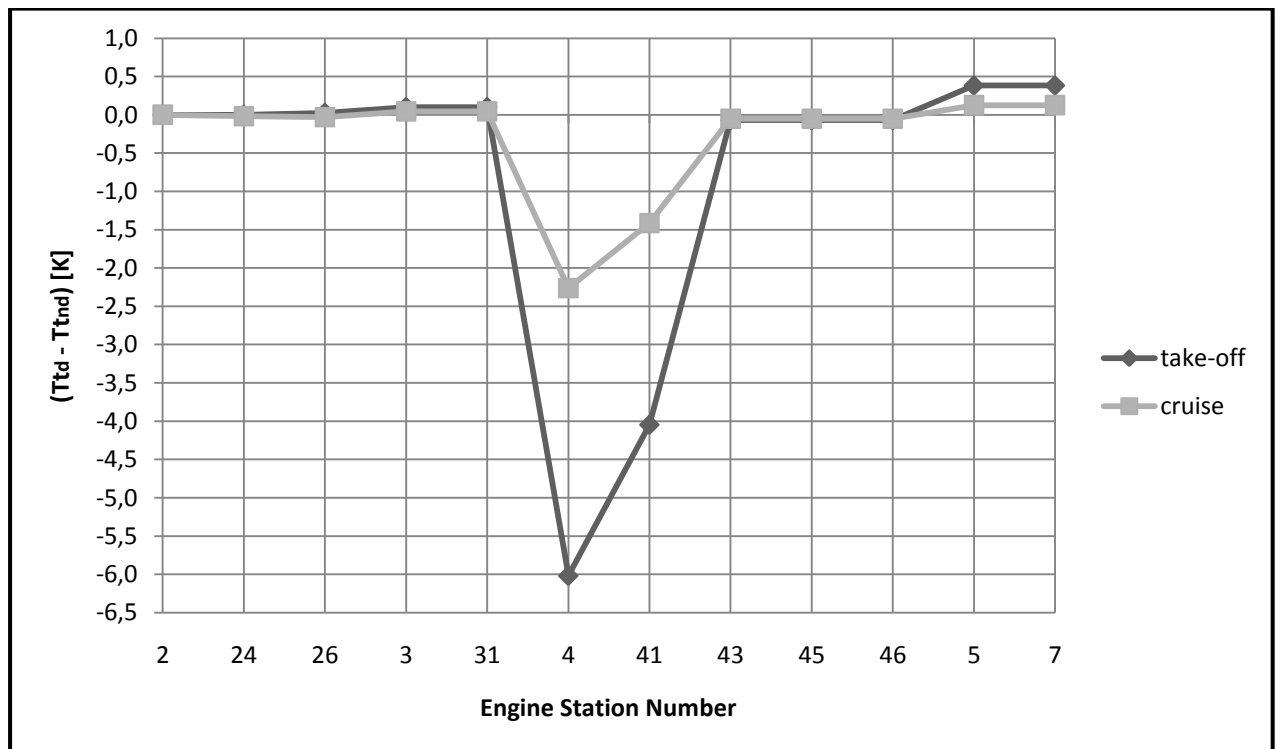
Η ώση επομένως για κάθε σημείο λειτουργίας είναι καθορισμένη. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης αυτής φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα.



Σχήμα 4.12: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας.



Σχήμα 4.13: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας.



Σχήμα 4.14: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου που προκύπτει από την καύση του Jet-A(g) με το dissociation μοντέλο από το no dissociation μοντέλο για τον κινητήρα CFM56 σε δύο σημεία λειτουργίας.

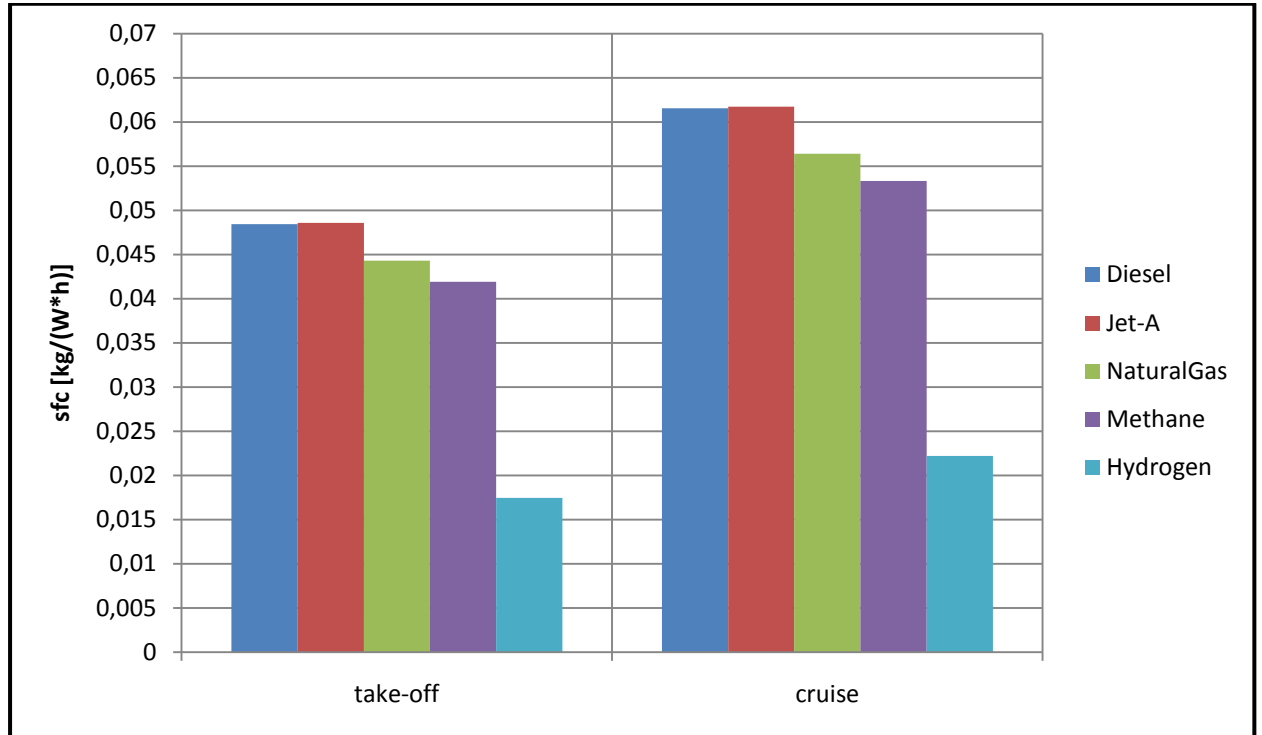
Οι διαφορές που παρουσιάζονται στα προηγούμενα διαγράμματα είναι γενικά μικρές (της τάξης του 0.07% για την πίεση, 0.25% για την παροχή). Στις θερμοκρασίες ωστόσο παρουσιάζεται μια διαφορά μετά το θάλαμο καύσης της τάξης των 6K στην απογείωση. Επίσης παρατηρούμε ότι οι διαφορές είναι μεγαλύτερες για την περίπτωση της απογείωσης όπου παρουσιάζονται και υψηλότερες θερμοκρασίες στις διάφορες θέσεις του κινητήρα. Τα ίδια συμπεράσματα προκύπτουν και από την μελέτη με διαφορετικά καύσιμα (diesel, υδρογόνο, φυσικό αέριο).

Ο κινητήρας αυτός επειδή παρουσιάζει γενικά χαμηλές θερμοκρασίες (<1500K στην πλειοψηφία των περιπτώσεων) δεν μπορεί να αιτιολογήσει τη διαφορά που υπάρχει στη χρησιμοποίηση του μοντέλου της χημικής διάστασης (dissociation model) αντί του μοντέλου της σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης (no dissociation model). Αυτό θα μπορούσε να γίνει από την μελέτη ενός κινητήρα με μεγαλύτερες θερμοκρασίες και πιέσεις όπως είναι οι πολιτικοί κινητήρες με ενδιάμεση ψύξη π.χ. ο κινητήρας GTAC της δεύτερης εφαρμογής.

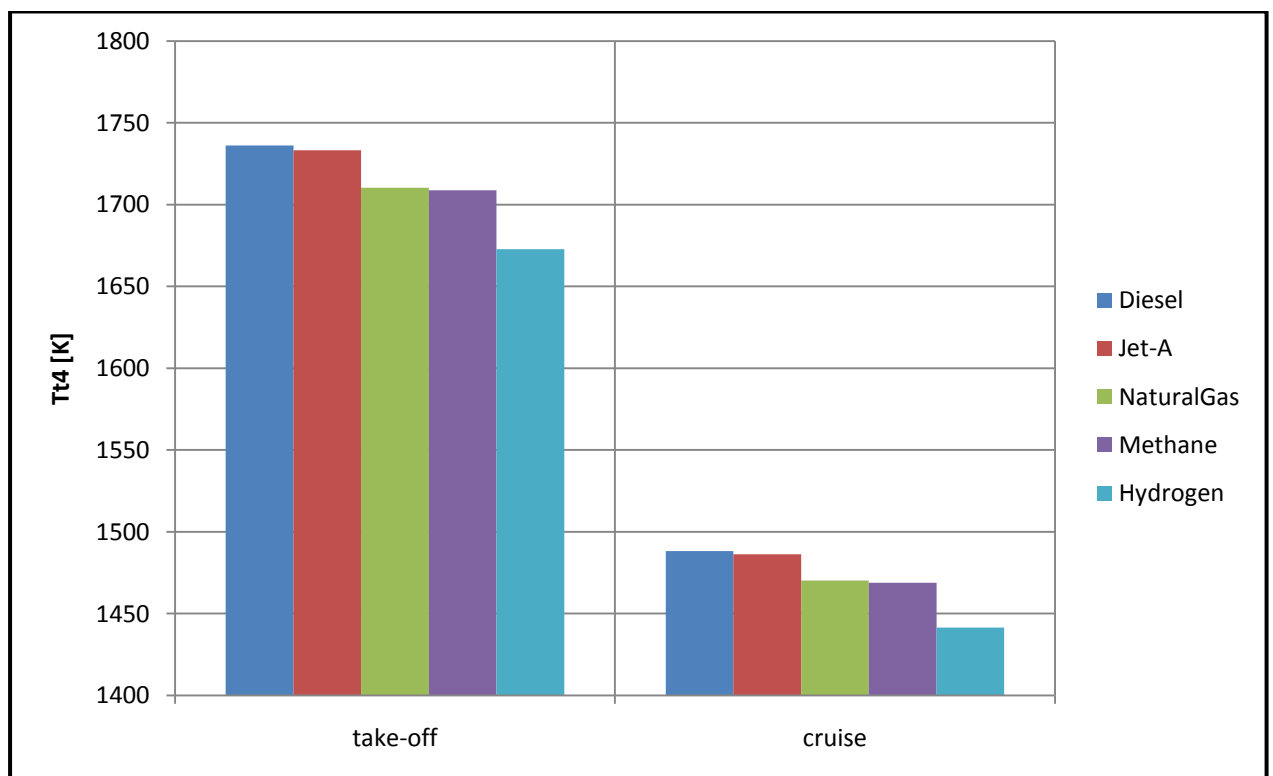
Επίσης θα ήταν προτιμότερο να μελετήσουμε την επίδραση του μοντέλου της καύσης όταν κάνουμε υπολογισμούς για τη σχεδίαση της μηχανής [10] και όχι όταν έχουμε ήδη σχεδιασμένη τη μηχανή και μελετάμε τη λειτουργία της σε διάφορα σημεία όπως και έγινε εδώ. Στα δύο deck της δεύτερης εφαρμογής μελετάται ο αντίκτυπος του μοντέλου της καύσης τόσο στην περίπτωση που έχουμε έτοιμη τη μηχανή όσο και στην περίπτωση που κάνουμε επανασχεδίαση της μηχανής σύμφωνα με κάποιες απαιτήσεις στο σημείο σχεδίασης.

Επίδραση σύνθεσης καυσίμου σε παραμέτρους της μηχανής

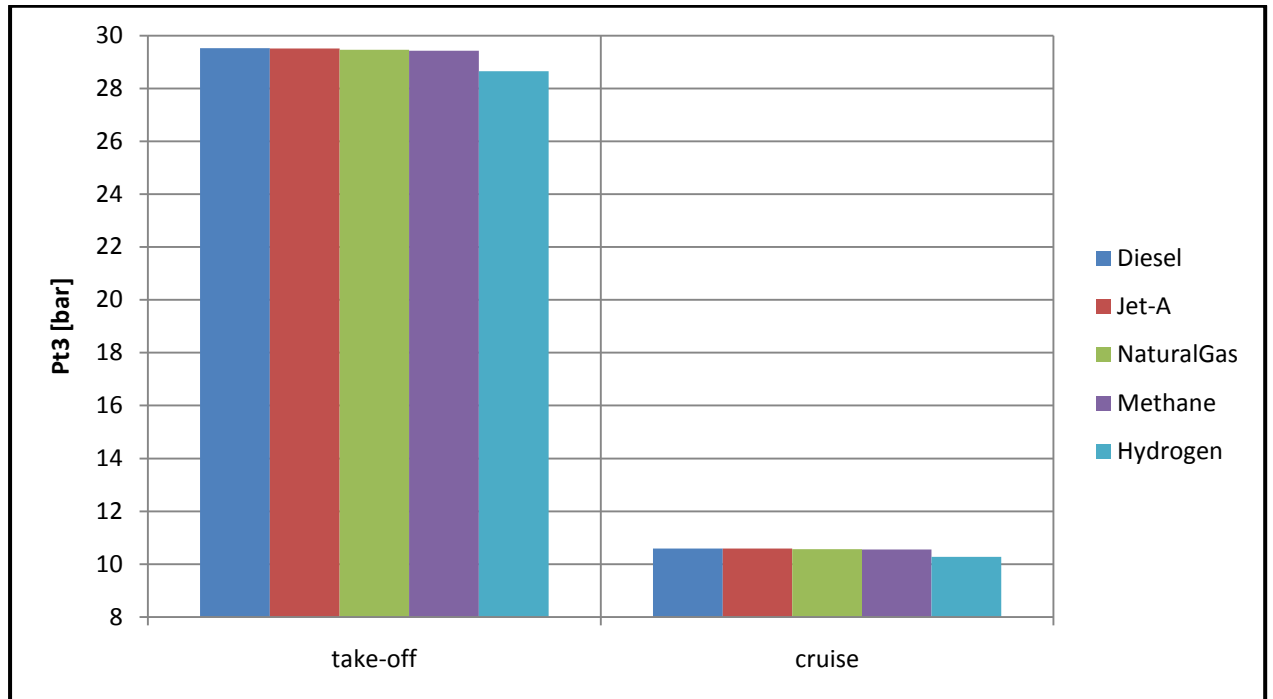
Οι δεύτεροι υπολογισμοί έγιναν για να μελετήσουμε την επίδραση που έχουν διάφορα εναλλακτικά καύσιμα όπως το φυσικό αέριο, το μεθάνιο και το υδρογόνο με τη θεώρηση της πλήρους διάστασης (dissociation models) σε βασικές παραμέτρους της μηχανής όπως η θερμοκρασία εξόδου των καυσαερίων από το θάλαμο καύσης T_{14} , η πίεση P_{13} , η ειδική κατανάλωση καυσίμου SFC καθώς και η κατανάλωση καυσίμου W_{fu} για τα παραπάνω σημεία απογείωσης και πλεύσης. Στα επόμενα διαγράμματα φαίνονται τα αποτελέσματα της μελέτης.



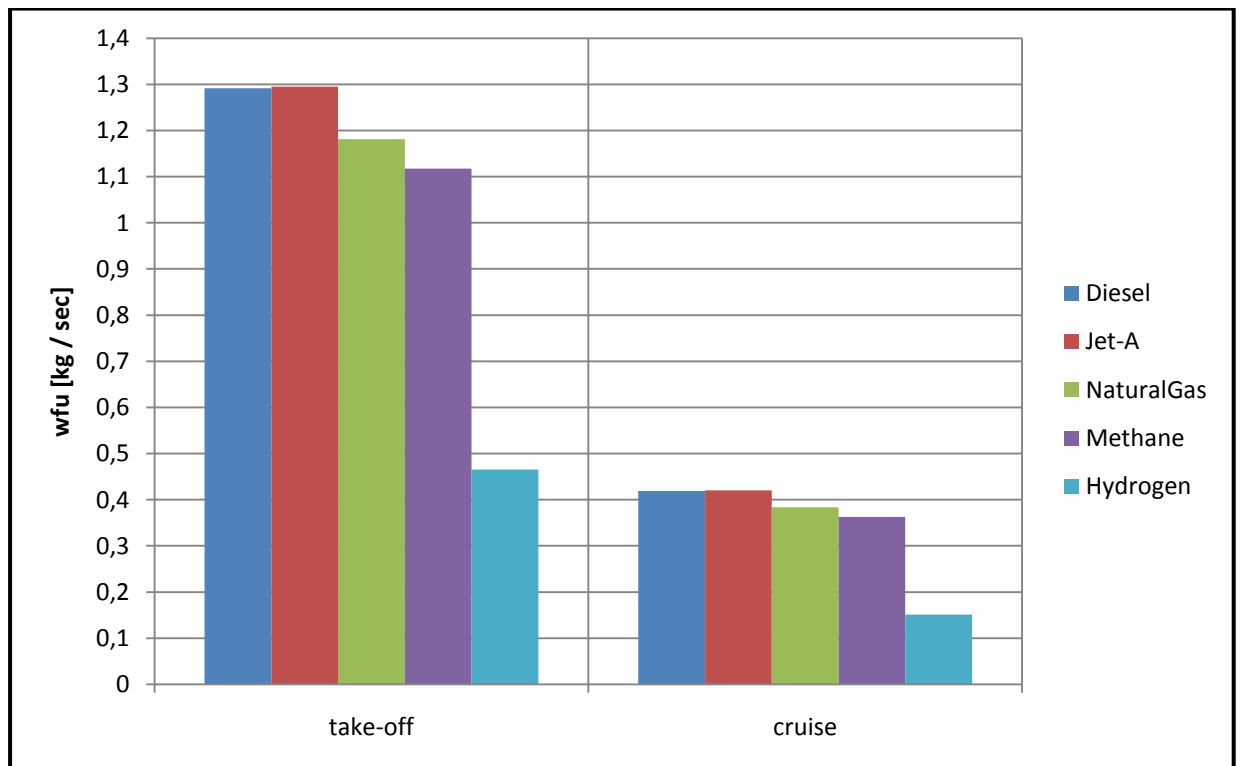
Σχήμα 4.15: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην ειδική κατανάλωση καυσίμου της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.



Σχήμα 4.16: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην θερμοκρασία εξόδου των καυσαερίων από το θάλαμο καύσης της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.



Σχήμα 4.17: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην πίεση εξόδου του αέρα από το συμπιεστή υψηλής πίεσεως της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.



Σχήμα 4.18: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στην κατανάλωση καυσίμου της μηχανής CFM56 για τα δύο σημεία λειτουργίας.

Αμα επικεντρώσουμε τις παρατηρήσεις μας στην περίπτωση της απογείωσης που είναι η πιο απαιτητική από άποψης ισχύος, πιέσεων και θερμοκρασιών μπορούμε να συμπεράνουμε τα εξής:

- Τα καύσιμα κατά σειρά Jet-A(g), Diesel(g), Φυσικό αέριο, Μεθάνιο, Υδρογόνο παρουσιάζουν μειούμενη κατανάλωση καυσίμου για να παράγουν την ίδια ώση με την μεγάλη διαφορά βέβαια να βρίσκεται στο Υδρογόνο που καταναλώνει λιγότερη από την μισή ποσότητα σε kg (είτε ανά παραγόμενη Wh είτε ανά sec) σε σχέση με τα άλλα καύσιμα. Ωστόσο για να παραχθεί αυτή η ποσότητα Υδρογόνου σε kg λόγω της πολύ μικρής πυκνότητάς του, χρειαζόμαστε τεράστιο όγκο για την αποθήκευσή του και έτσι αντισταθμίζεται σε κάποιο βαθμό το πλεονέκτημα της κατανάλωσής του.
- Το Υδρογόνο παρουσιάζει θερμοκρασία T_{t4} μειωμένη κατά 60K περίπου και πίεση P_{t3} κατά 1bar σε σχέση με το Jet-A. Ανάλογες μειώσεις αλλά σε μικρότερο βαθμό παρατηρούνται και για τα υπόλοιπα αέρια καύσιμα (Μεθάνιο και Φυσικό αέριο) με αποτέλεσμα να μειώνονται οι θερμικές καταπονήσεις της μηχανής και να είμαστε πιο ελαστικοί στις απαιτήσεις μας για τα υλικά κατασκευής.

Ωστόσο υπάρχει πέρα του ζητήματος της αποθήκευσής τους και οι δυσκολίες σχετικά με την παραγωγή τους. Κάτι τέτοιο βέβαια δεν ισχύει για το φυσικό αέριο και γι' αυτό το καύσιμο αυτό μαζί με τα βιοκαύσιμα συγκεντρώνουν το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας για άμεση χρήση στους αεριοστροβίλους.

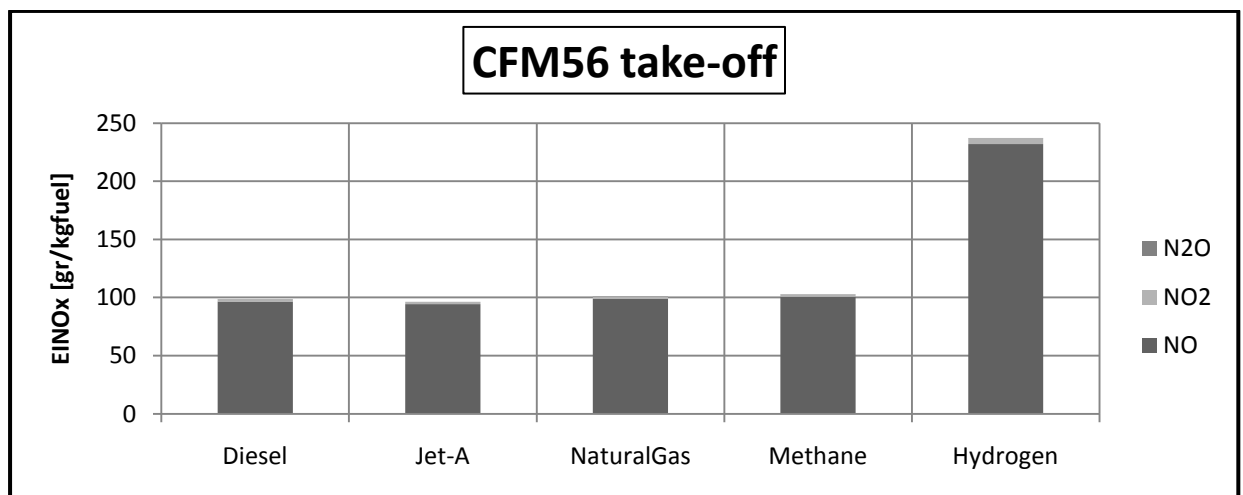
Επίδραση σύνθεσης καυσίμου στα παραγόμενα καυσαέρια

Χρησιμοποιώντας το deck του CFM56, κατά την απογείωση της μηχανής, έγινε μια παραμετρική μελέτη ως προς τη συγκέντρωση των αερίων ρυπαντών NOx & CO στα καυσαέρια που προήλθαν από την καύση διαφόρων καυσίμων όπως Diesel(g), Jet-A(g), Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο με τη θεώρηση της πλήρους διάστασης (dissociation models).

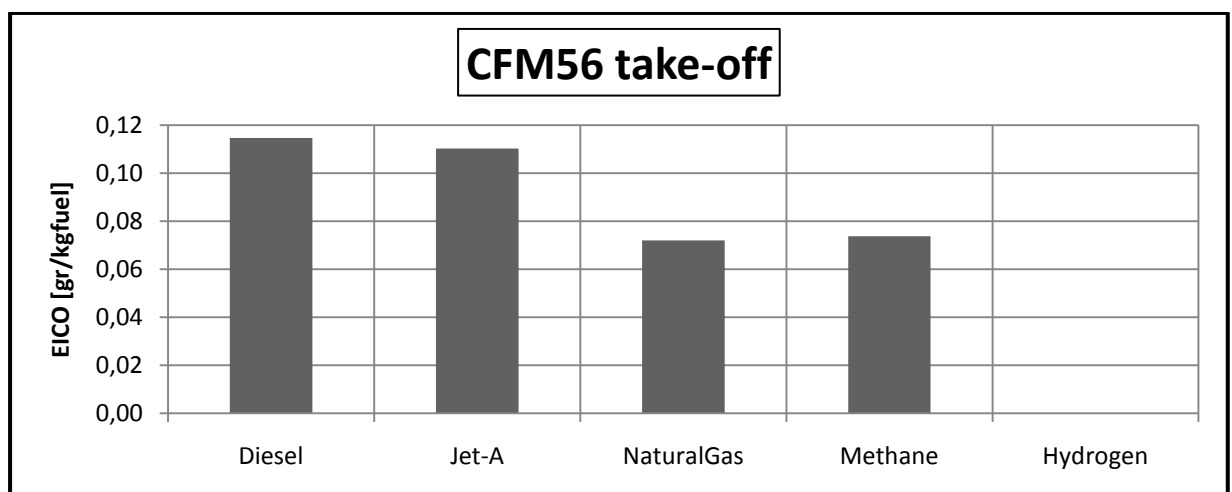
Τα αποτελέσματα προέκυψαν από τη μελέτη με το NASA CEA καθώς το PROOSIS δεν μας δίνει τη δυνατότητα για υπολογισμούς της συστάσεως των

καυσαερίων. Από το PROOSIS ωστόσο προήλθαν τα απαραίτητα δεδομένα για τον κύκλο της μηχανής ώστε να κάνουμε τη μοντελοποίηση της καύσης στο CEA (τη πρόβλεψη) όπως η θερμοκρασία εξόδου των καυσαερίων από το θάλαμο καύσης T_{t4} , η πίεση της καύσης P_{t4} και ο λόγος καυσίμου-αέρα στο θάλαμο καύσης.

Από το CEA λαμβάνουμε τις κατά μάζα αναλογίες των αερίων ρυπαντών NO, NO₂, N₂O και CO στο καυσαέριο. Πολλαπλασιάζοντας αυτές επί χίλια για να μετατρέψουμε τα kg του κάθε ρυπαντή σε gr και με την ποσότητα $\frac{1+far}{far}$ για ν' ανάγουμε τα kg του καυσαερίου σε kg καυσίμου παίρνουμε την αναλογία των ρυπαντών σε gr / kg καυσίμου. Τα NO_x προκύπτουν σαν το άθροισμα των NO, NO₂ και N₂O. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα.



Σχήμα 4.19: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στα παραγόμενα οξειδία του αζώτου από την μηχανή CFM56 κατά την απογείωση.



Σχήμα 4.20: Επίδραση σύνθεσης καυσίμου με το dissociation μοντέλο στο παραγόμενο μονοξείδιο του άνθρακα από την μηχανή CFM56 κατά την απογείωση.

Από τα δύο παραπάνω διαγράμματα μπορούν να εξαχθούν τα εξής συμπεράσματα:

- Το μονοξείδιο του αζώτου αποτελεί το βασικότερο ποσοστό των οξειδίων του αζώτου σε βαθμό τέτοιο που θα μπορούσε να αγνοηθεί η επίδραση του NO_2 και του N_2O .
- Λόγω και των φτωχών συνθηκών καύσης που επικρατούν στους αεριοστρόβιλους τα NO_x που παράγονται είναι σημαντικά μεγαλύτερα από το μονοξείδιο του άνθρακα (3 τάξεις μεγέθους περίπου).
- Ανά kg οξειδωμένου καυσίμου το Υδρογόνο εκλύει περίπου τα διπλάσια οξείδια του αζώτου σε σχέση με τα υπόλοιπα καύσιμα. Ωστόσο αν λάβουμε υπόψη το διάγραμμα 4.18 όπου φαίνεται η κατανάλωση καυσίμου ανά sec για κάθε καύσιμο, η κατανάλωση του Υδρογόνου είναι περίπου στο 30% σε σχέση με την κατανάλωση των υπόλοιπων καυσίμων (για την απογείωση). Επομένως τελικά παράγει λιγότερα NO_x ανά δευτερόλεπτο από τα υπόλοιπα καύσιμα.
- Το μονοξείδιο του άνθρακα είναι περισσότερο για τα Jet-A(g) και Diesel(g) τα οποία έχουν και περισσότερα άτομα άνθρακα στον μοριακό τους τύπο. Έτσι για το Μεθάνιο και το Φυσικό αέριο έχουμε χαμηλότερα επίπεδα CO ενώ στο Υδρογόνο μηδενίζονται εντελώς.

Επίδρασης χημικής διάστασης στην σύνθεση του ατμοσφαιρικού αέρα.

Στην πρώτη ενότητα του κεφαλαίου αυτού αναφέρθηκε το γεγονός ότι ακόμα και ο ατμοσφαιρικός αέρας δίσταται αλλά σαφώς σε μικρότερο βαθμό λόγω και της χαμηλής του θερμοκρασίας. Έτσι ακολούθησε μια μελέτη για να διαπιστώσουμε την επίδραση που έχει η διάσταση στη σύνθεση του ατμοσφαιρικού αέρα.

Κατά την απογείωση του κινητήρα CFM56 στην έξοδο των συμπιεστών (σημείο 3) έχουμε τα εξής θερμοδυναμικά χαρακτηριστικά για τον ξηρό αέρα:

- $P_{t3} = 29,5\text{bar}$
- $T_{t3} = 835,29\text{K}$

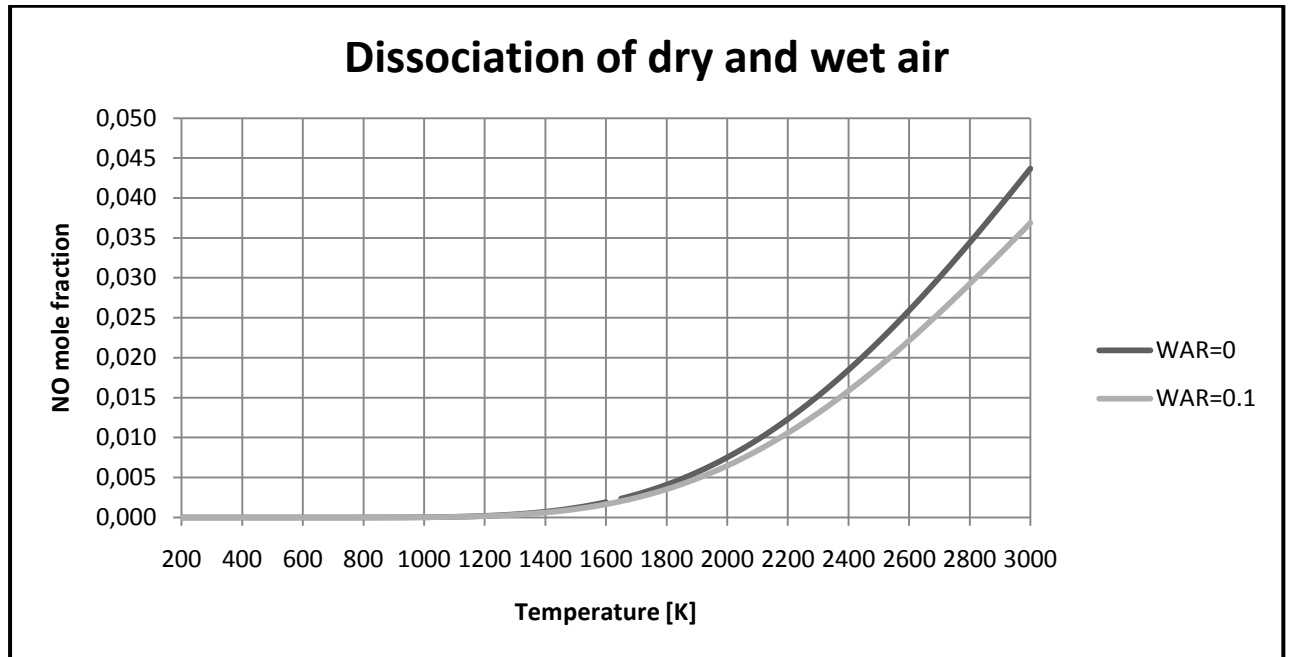
Βάζοντας τα παραπάνω δεδομένα στο NASA CEA (tr πρόβλημα) καθώς και ότι $FAR=0$ ($WAR=0$) προκύπτει η εξής αναλογία μαζών για τους αέριους ρυπαντές NO και NO₂ στον αέρα:

- 3,6858 μg NO / kg αέρα
- 6,5693 μg NO₂ / kg αέρα

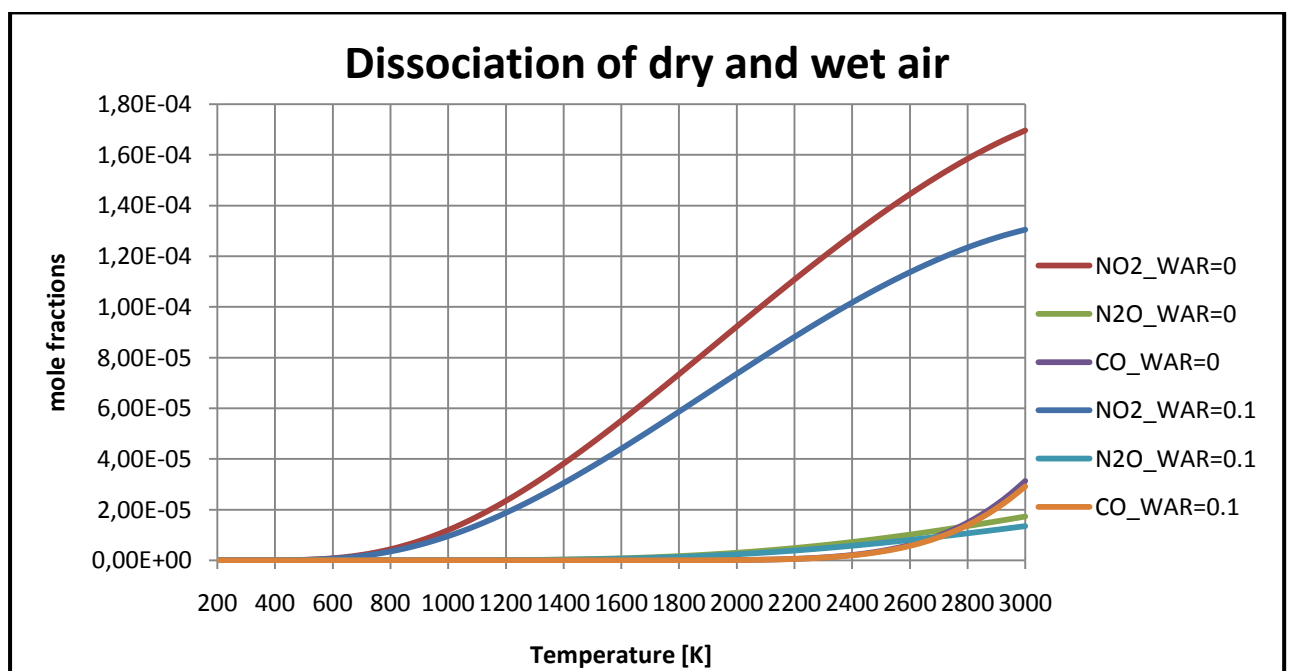
Στην έξοδο των συμπιεστών έχουμε παροχή αέρα που φτάνει τα 59,173 kg/sec. Επομένως **κάθε δευτερόλεπτο** γίνεται έκλυση:

- 218,1 μg NO
- 388,725 μg NO₂

Στα επόμενα σχήματα φαίνεται σε μεγαλύτερο εύρος τιμών η διάσταση του ατμοσφαιρικού υγρού και ξηρού αέρα για $P=29.5\text{bar}$.



Σχήμα 4.21: Γραμμομοριακή αναλογία NO στον ατμοσφαιρικό ξηρό και υγρό αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας στα 29.5bar.

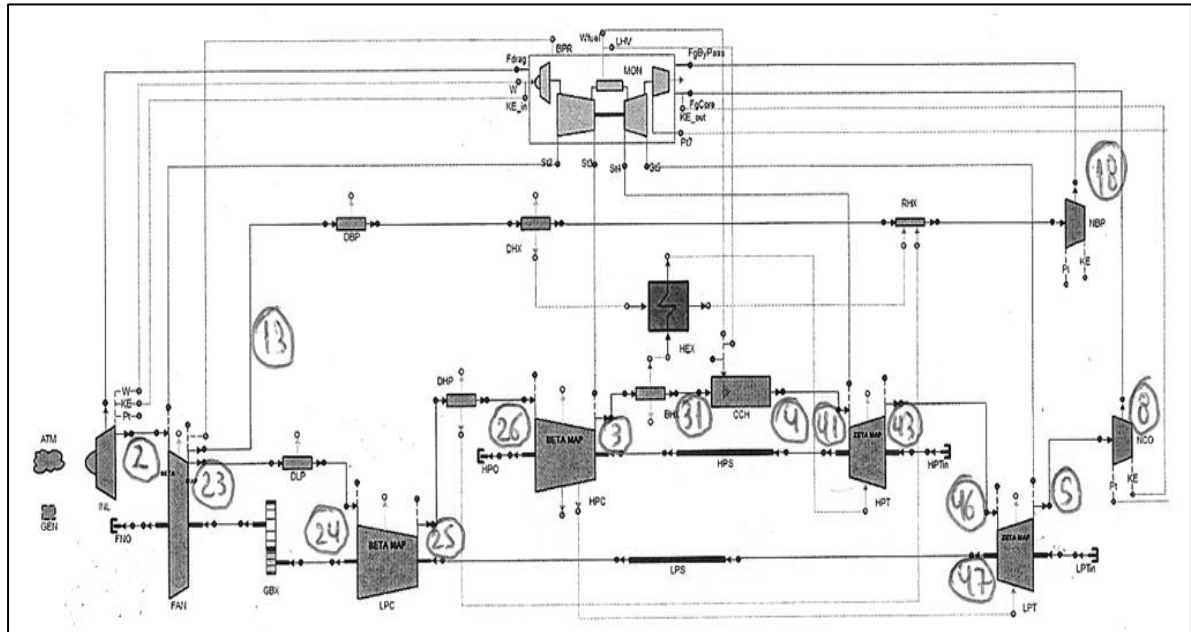


Σχήμα 4.22: Γραμμομοριακή αναλογία NO₂, N₂O και CO στον ατμοσφαιρικό ξηρό και υγρό αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας στα 29.5bar.

Από την παραπάνω ανάλυση και διαγράμματα συμπεραίνουμε ότι ακόμα και ο ατμοσφαιρικός αέρας δίσταται και επιπλέον ο συμπιεσμένος αέρας που έχει υψηλή σχετικά θερμοκρασία παράγει μια σεβαστή ποσότητα οξειδίων του αζώτου.

4.4.2 Μελέτη 2^η : GTAC

Το μοντέλο και η αρίθμηση των θέσεων του κινητήρα GTAC στο PROOSIS φαίνονται στο ακόλουθο σχήμα:



Σχήμα 4.23: Μοντέλο κινητήρα GTAC στο PROOSIS.

Τα deck που χρησιμοποιήθηκαν στην μελέτη αυτή είναι δύο:

- **GTACLR_Fn_OD_fuelStudyDeck:** το οποίο όπως και το deck του CFM υποθέτει ότι η μηχανή είναι ήδη σχεδιασμένη και απλά μεταβάλλουμε το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου για να δούμε την απόδοσή της. Η μελέτη γίνεται σε τρία σημεία:
 - **Take-off:** Mach = 0.25, Ύψος = 0m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 15K, Ωση= 251.5kN, ανοιχτός ο εναλλάκτης θερμότητας.
 - **Cruise:** Mach = 0.82, Ύψος = 10668m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 0K, Ωση= 51.1kN, κλειστός ο εναλλάκτης θερμότητας.
 - **Top of climb (Σημείο σχεδίασης μηχανής):** Mach = 0.82, Ύψος = 10668m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας

περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 10K, Ωση= 67.3kN, ανοιχτός ο εναλλάκτης θερμότητας.

Ωστόσο η μελέτη μας σ' αυτό το deck θα περιοριστεί στο σημείο σχεδίασης της μηχανής (top of climb) από το οποίο θα βγάλουμε χρήσιμα συμπεράσματα για την ανάλυση που ακολουθεί στο 2° deck.

- **GTACLR_TET_DP_fuelStudyDeck:** το οποίο κάνει υπολογισμούς για δύο σημεία λειτουργίας της μηχανής:
 - **Take-off:** Mach = 0.25, Ύψος = 0m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 15K, $T_{t4} = 2035.5K$, ανοιχτός ο εναλλάκτης θερμότητας.
 - **Cruise:** Mach = 0.82, Ύψος = 10668m, Σχετική υγρασία = 0%, Διαφορά θερμοκρασίας περιβάλλοντος από την αντίστοιχη της τυπικής ημέρας = 0K, $T_{t4} = 1611.3K$, κλειστός ο εναλλάκτης θερμότητας.

αφού πρώτα για το καθένα γίνει η σχεδίαση της μηχανής με βάση τις απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης που καθορίζονται στο αρχείο Engine_dp.dat. Στις περισσότερες περιπτώσεις (όπως και εδώ) το σημείο σχεδίασης για τους αεροπορικούς κινητήρες είναι στο ανώτερο σημείο της ανάβασης του αεροσκάφους (top of climb).

Η σχεδίαση της μηχανής καθορίζεται από τα εξής χαρακτηριστικά (Engine_dp.dat) που φαίνονται στον παρακάτω πίνακα:

Μέγεθος	Σύμβολο	Τιμή
Λόγος ρεύματος παράκαμψης	BPR	12.6
Ολική παροχή αέρα στην είσοδο της μηχανής	W_2	556.3kg/sec
Συνολικός λόγος συμπίεσης	OPR	57.8
Λόγος συμπίεσης ανεμιστήρα του ρεύματος παράκαμψης	P_{t13}/P_{t2}	1.55

Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης ανεμιστήρα του ρεύματος παράκαμψης	eff_{13}	0.9558
Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης ανεμιστήρα του εσωτερικού ρεύματος αέρα	eff_{23}	0.9162
Λόγος συμπίεσης συμπιεστή χαμηλής πίεσεως	P_{125}/P_{124}	2.75
Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης συμπιεστή χαμηλής πίεσεως	ef_{125}	0.9134
Λόγος συμπίεσης συμπιεστή υψηλής πίεσεως	P_{13}/P_{126}	16.0
Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης συμπιεστή υψηλής πίεσεως	eff_3	0.8911
Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης στροβίλου υψηλής πίεσεως	eff_{43}	0.92
Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης στροβίλου χαμηλής πίεσεως	eff_5	0.932
Ταχύτητα περιστροφής της ατράκτου υψηλής πίεσεως	N_1	11000 rpm
Ταχύτητα περιστροφής της ατράκτου χαμηλής πίεσεως	N_2	6493.8rpm
Θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης	T_{14}	1846.8K

Πίνακας 4.2: Απαιτήσεις σχεδίασης της μηχανής στο αρχείο Engine_dp.dat.

Το σύνηθες μοντέλο που χρησιμοποιείται για υπολογισμούς σχεδίασης στους αεριοστροβίλους είναι το Jet-A(g) με την υπόθεση της σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης (no dissociation model). Έτσι οι υπολογισμοί που έγιναν στην ακόλουθη ανάλυση είχαν σκοπό να αναδείξουν τη επίδραση που υπάρχει σε παραμέτρους της μηχανής, η οποία σχεδιάζεται στο 2^ο deck, όπως η διατομή εμβαδού του θερμού ακροφυσίου, η καθαρή ώση, η ειδική κατανάλωση καυσίμου κλπ. όταν αντί για το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation η σχεδίαση βασιστεί σε κάποιο άλλο μοντέλο εργαζόμενου μέσου που λαμβάνει υπόψη την πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης ή που περιλαμβάνει τις ιδιότητες του καυσαερίου που παράγεται από την καύση άλλων καυσίμων όπως το Φυσικό αέριο, Diesel, Υδρογόνο κλπ. Το 1^ο deck μας δίνει τη δυνατότητα να προβλέψουμε εάν είναι αναγκαία η

επανασχεδίαση της μηχανής και εάν ναι τις αποκλίσεις που αναμένεται να παρουσιάσει κάθε μοντέλο στην επανασχεδίαση σε σχέση με τη σχεδίαση που προκύπτει από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation.

1^o Deck - GTACLR_Fn_OD_fuelStudyDeck – Off-Design Deck

Με το πρώτο deck μελετάμε την επίδραση που έχει το κάθε μοντέλο εργαζόμενου μέσου, στο σημείο σχεδίασης, στις παραπάνω παραμέτρους του αρχείου Engine_dp.dat (Πίνακας 4.2) της ήδη σχεδιασμένης μηχανής. Στην περίπτωση αυτή τα χαρακτηριστικά αυτά μεταβάλλονται ελεύθερα και δεν είναι καθορισμένα όπως στο 2^o deck. Η μελέτη αυτή γίνεται με τον εξής τρόπο:

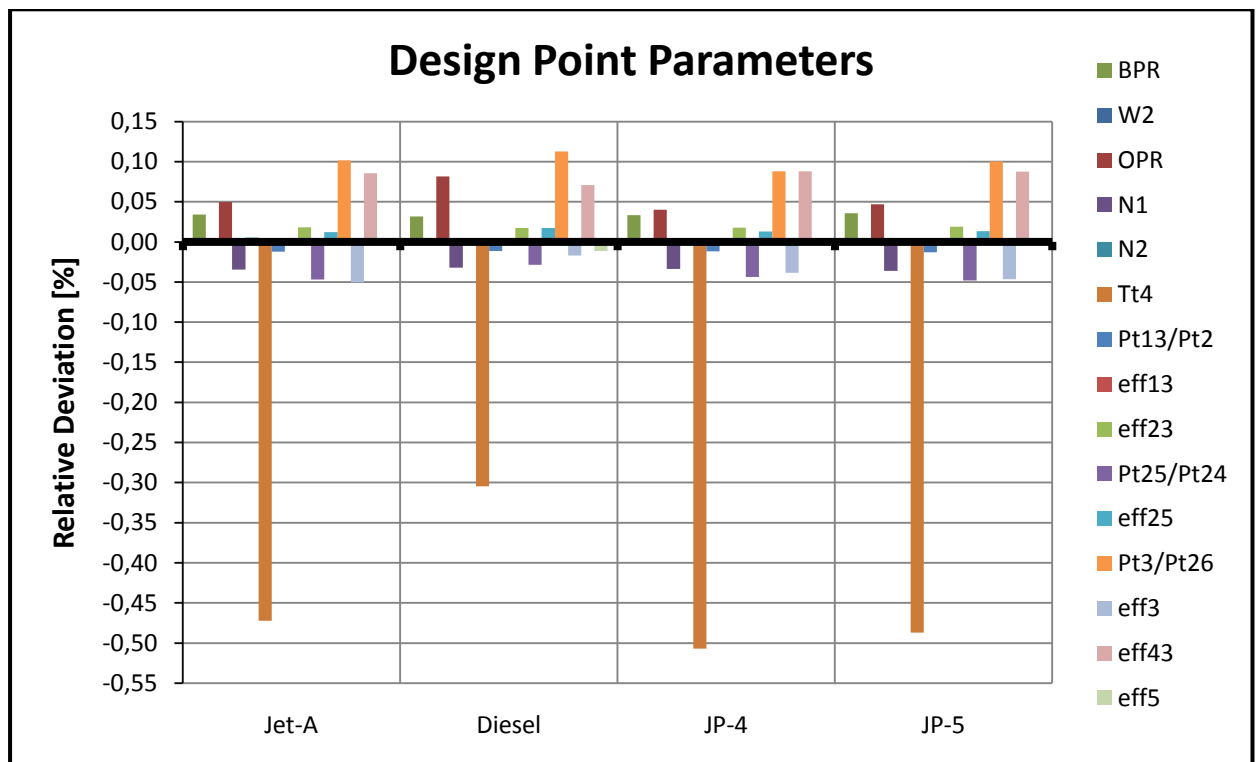
Το μοντέλο του Jet-A(g) no dissociation model έχει ρυθμιστεί ώστε να βγάζει σαν αποτελέσματα στο σημείο σχεδίασης τα αποτελέσματα που φαίνονται στον πίνακα 4.2. Αλλάζοντας το εργαζόμενο μέσο (είτε λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της χημικής διάστασης είτε αλλάζοντας τη σύνθεση του καυσίμου είτε και τα δυο) βλέπουμε την επίδραση που έχουν οι μεταβολές αυτές στις παραμέτρους του αρχείου Engine_dp. Έτσι μπορούμε να ισχυριστούμε για το αν απαιτείται επανασχεδίαση της μηχανής και να προβλέψουμε ποιο καύσιμο θα παρουσιάζει τις μεγαλύτερες αποκλίσεις από τη σχεδίαση που προκύπτει με το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation.

Η σύγκριση με το Jet-A(g) no dissociation model (τιμές αναφοράς) έγινε για τα καύσιμα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4, JP-5, Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο λαμβάνοντας υπόψη τη χημική διάσταση (dissociation models). Από τα τρεξίματα που έγιναν προέκυψαν τα δεδομένα και οι ποσοστιαίες αποκλίσεις από τις τιμές αναφοράς που φαίνονται στον πίνακα της επόμενης σελίδας.

Fuel	BPR	W2	OPR	N1	N2	Tt4	Pt13/Pt2	eff13	eff23	Pt25/Pt24	eff25	Pt3/Pt26	eff3	eff43	eff5
Jet-And (Ref)	12,5999	556,2941	57,8084	6493,4263	10997,9766	1847,5850	1,5502	0,9561	0,9164	2,7502	0,9134	16,0018	0,8908	0,9199	0,9320
Jet-A	12,6042	556,2974	57,8372	6491,1956	10998,5639	1838,8602	1,5500	0,9560	0,9166	2,7489	0,9135	16,0180	0,8903	0,9207	0,9319
Deviation	0,034	0,001	0,050	-0,034	0,005	-0,472	-0,012	-0,003	0,018	-0,047	0,012	0,101	-0,051	0,086	-0,004
Diesel	12,6040	556,3026	57,8556	6491,3483	10997,7460	1841,9558	1,5500	0,9560	0,9166	2,7494	0,9136	16,0198	0,8906	0,9205	0,9319
Deviation	0,032	0,002	0,082	-0,032	-0,002	-0,305	-0,011	-0,003	0,018	-0,029	0,017	0,113	-0,017	0,071	-0,011
JP-4	12,6041	556,2990	57,8314	6491,2440	10998,2590	1838,2147	1,5500	0,9560	0,9166	2,7490	0,9135	16,0158	0,8904	0,9207	0,9320
Deviation	0,033	0,001	0,040	-0,034	0,003	-0,507	-0,012	-0,003	0,018	-0,044	0,013	0,088	-0,038	0,088	-0,003
JP-5	12,6045	556,2933	57,8356	6491,0791	10998,3965	1838,5901	1,5500	0,9560	0,9166	2,7489	0,9135	16,0178	0,8903	0,9207	0,9319
Deviation	0,036	0,000	0,047	-0,036	0,004	-0,487	-0,013	-0,003	0,019	-0,048	0,013	0,100	-0,047	0,088	-0,004
NaturalGas	12,5994	556,3796	57,6444	6493,5368	11016,5543	1818,2710	1,5503	0,9561	0,9163	2,7437	0,9125	15,9996	0,8847	0,9214	0,9325
Deviation	-0,004	0,015	-0,284	0,002	0,169	-1,587	0,004	0,002	-0,009	-0,239	-0,098	-0,013	-0,676	0,163	0,055
Methane	12,5992	556,3829	57,5479	6493,6269	11018,4969	1816,4856	1,5503	0,9561	0,9163	2,7425	0,9123	15,9808	0,8841	0,9216	0,9325
Deviation	-0,006	0,016	-0,451	0,003	0,187	-1,683	0,005	0,002	-0,011	-0,282	-0,117	-0,131	-0,746	0,180	0,060
Hydrogen	12,6044	556,2448	55,5101	6489,3333	11299,1044	1804,9454	1,5501	0,9561	0,9159	2,6600	0,8998	15,9444	0,8448	0,9341	0,9347
Deviation	0,035	-0,009	-3,976	-0,063	2,738	-2,308	-0,003	0,003	-0,058	-3,280	-1,484	-0,359	-5,163	1,539	0,292

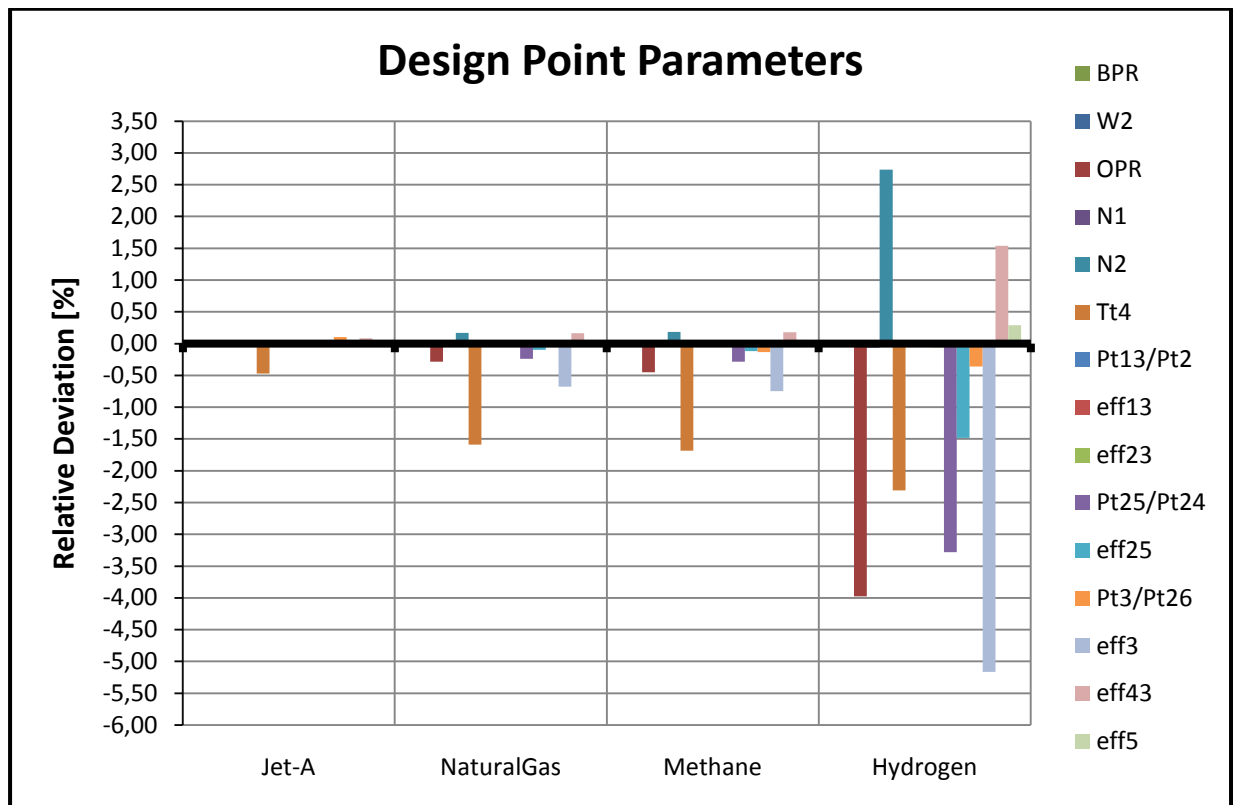
Για τα καύσιμα Jet-A, Diesel, JP-4 και JP-5 οι κυριότερες ποσοστιαίες αποκλίσεις (0.3 – 0.5%) παρατηρούνται στη θερμοκρασία εξόδου των καυσαερίων από το θάλαμο καύσης δηλαδή στην T_{t4} . Επίσης διαπιστώνεται ότι η απόκλιση της θερμοκρασίας είναι μικρότερη για το Diesel παρά για το Jet-A ενώ ακολουθούν τα JP-5 και JP-4.

Η παρατήρηση αυτή επιβεβαιώνεται και από το επόμενο σχήμα:



Σχήμα 4.24: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 dissociation.

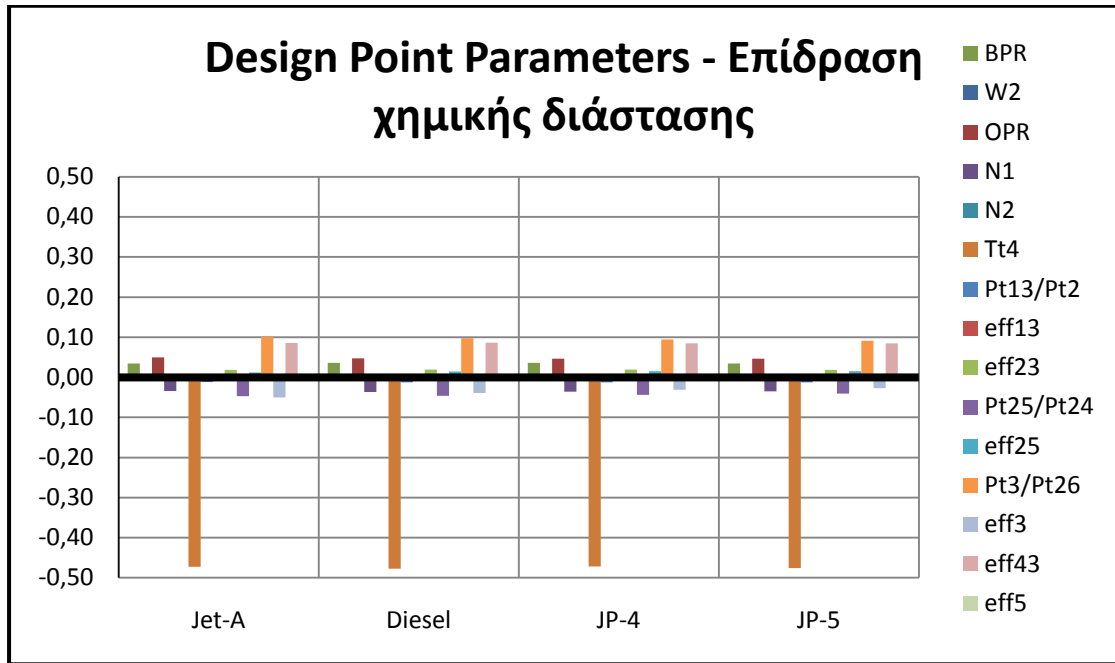
Παρόμοιο διάγραμμα έγινε για εποπτικούς λόγους και για τα καύσιμα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο. Παρατηρούμε και πάλι μεγάλες αποκλίσεις στη θερμοκρασία T_{t4} (πάνω από 1.5%) ενώ οι αποκλίσεις στην περίπτωση του Υδρογόνου είναι μεγάλες για την πλειοψηφία των παραμέτρων που εξετάζονται. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο ακόλουθο σχήμα.



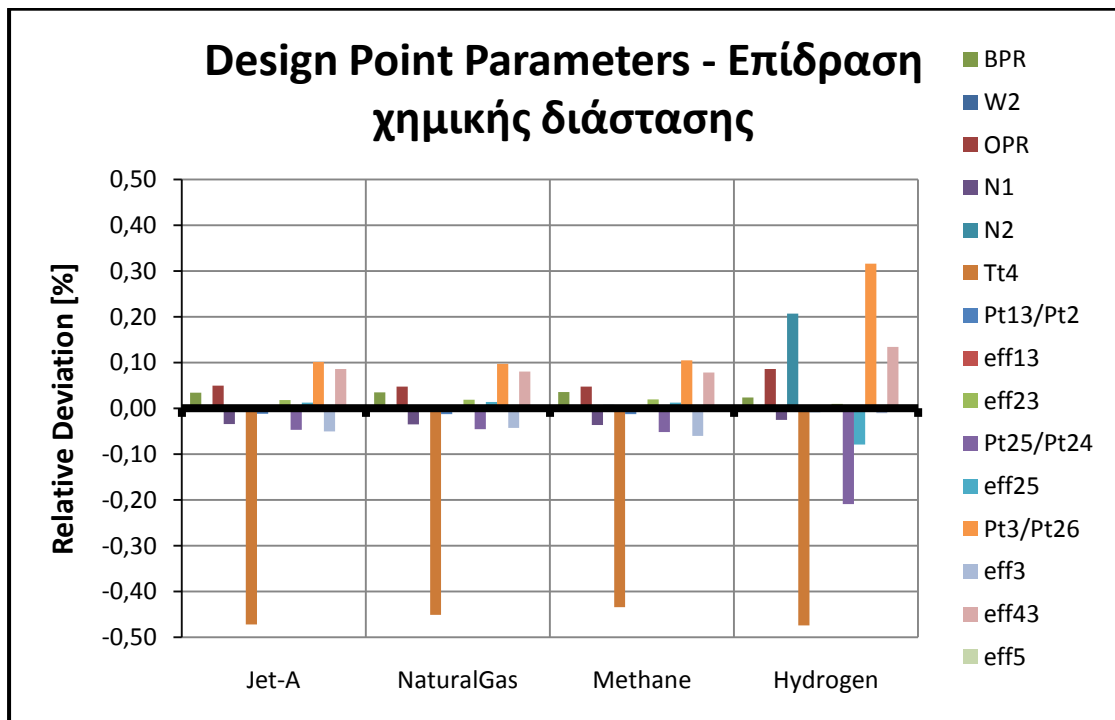
Σχήμα 4.25: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen dissociation.

Πρέπει να τονίσουμε ότι οι διαφορές όταν αναφερόμαστε στο μοντέλο Jet-A(g) dissociation οφείλονται καθαρά και μόνο στην αλλαγή του μοντέλου της καύσης δηλαδή στη θεώρηση της πλήρους χημικής διάστασης των προϊόντων της καύσης καθώς η σύγκριση γίνεται πάντοτε με το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation. Οι διαφορές για τα υπόλοιπα μοντέλα δηλαδή Diesel(g) dissociation, Hydrogen dissociation κλπ. οφείλονται τόσο στην αλλαγή του μοντέλου της καύσης όσο και στην αλλαγή της σύνθεσης του καυσίμου.

Ενδεικτικά παραθέτουμε και τα ακόλουθα σχήματα στα οποία φαίνεται η επίδραση μόνο του μοντέλου της καύσης για καθένα καύσιμο δηλαδή της πλήρους διάστασης σε σχέση με το μοντέλο σταθερής σύστασης του καυσαερίου π.χ. Hydrogen no dissociation - Hydrogen dissociation, Diesel(g) no dissociation - Diesel(g) dissociation κλπ.



Σχήμα 4.26: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 & JP-5 dissociation αντίστοιχα.



Σχήμα 4.27: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen no dissociation για τα μοντέλα Jet-A(g), NaturalGas, Methane & Hydrogen dissociation αντίστοιχα.

Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε ότι για τα καύσιμα Jet-A, Diesel, JP-4, JP-5, Φυσικό αέριο και Μεθάνιο το προφίλ των αποκλίσεων των μοντέλων της χημικής διάστασης είναι σχεδόν ταυτόσημο. Αντίθετα για το Υδρογόνο, που δεν περιέχει άνθρακα όπως οι παραπάνω υδρογονάνθρακες και οι μηχανισμοί που διέπουν τη διάστασή του είναι εντελώς διαφορετικοί, οι αποκλίσεις είναι μεγαλύτερες για το σύνολο των παραμέτρων που εξετάζονται.

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζονται συγκεντρωτικά για κάθε μοντέλο η ποσοστιαία απόκλιση της θερμοκρασίας T_{i4} από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation.

Μοντέλο πλήρης διάστασης	Ποσοστιαία απόκλιση θερμοκρασίας T_{i4}
Jet-A(g)	-0,472
Diesel(g)	-0,305
JP-4	-0,507
JP-5	-0,487
NaturalGas	-1,587
Methane	-1,683
Hydrogen	-2,308

Στο δεύτερο deck στο σημείο σχεδίασης οι παράμετροι που εξετάστηκαν (Πίνακας 4.2) είναι σταθερές και ίσες με τις τιμές του αρχείου engine_dp.dat για οποιοδήποτε μοντέλο εργαζόμενου μέσου έχουμε καθώς θέλουμε να κάνουμε σχεδίαση της μηχανής με βάση αυτές τις απαιτήσεις.

Συμπερασματικά μπορούμε να υποστηρίξουμε από την ανάλυση που έγινε παραπάνω ότι και για τα επτά μοντέλα καυσίμων απαιτείται επανασχεδίαση της μηχανής λόγω της σημαντικής απόκλισης της T_{i4} και σαν μέτρο σύγκρισης περιμένουμε τις μεγαλύτερες αποκλίσεις να τις έχουμε με τη σειρά από τα dissociation μοντέλα: Hydrogen, Methane, NaturalGas, JP-4, JP-5, Jet-A(g) ενώ από το μοντέλο Diesel(g) περιμένουμε να προκύπτει σχεδίαση της μηχανής αρκετά κοντά σ' αυτή που προκύπτει με το Jet-A(g) no dissociation.

2^ο Deck - GTACLR_TET_DP_fuelStudyDeck – Design Deck

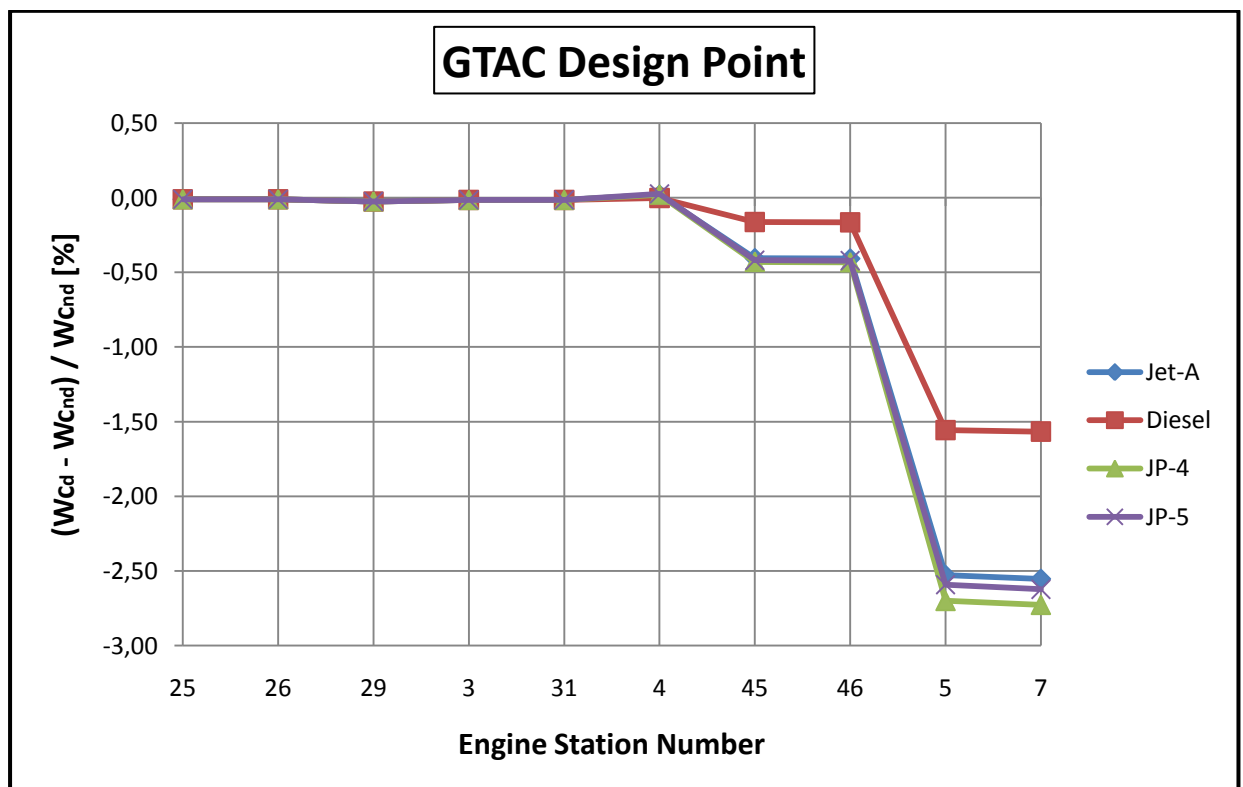
Όπως αναφέρθηκε, στο 2^ο deck γίνεται η σχεδίαση της μηχανής, πριν γίνουν οι υπολογισμοί των δύο σημείων λειτουργίας, με βάση τις τιμές των παραμέτρων σχεδίασης που καθορίζονται στο αρχείο Engine_dp.dat. Στην ανάλυση που ακολουθεί

μελετάται η επίδραση που έχει το κάθε μοντέλο εργαζόμενου μέσου σε διάφορες παραμέτρους της μηχανής που επανασχεδιάζεται.

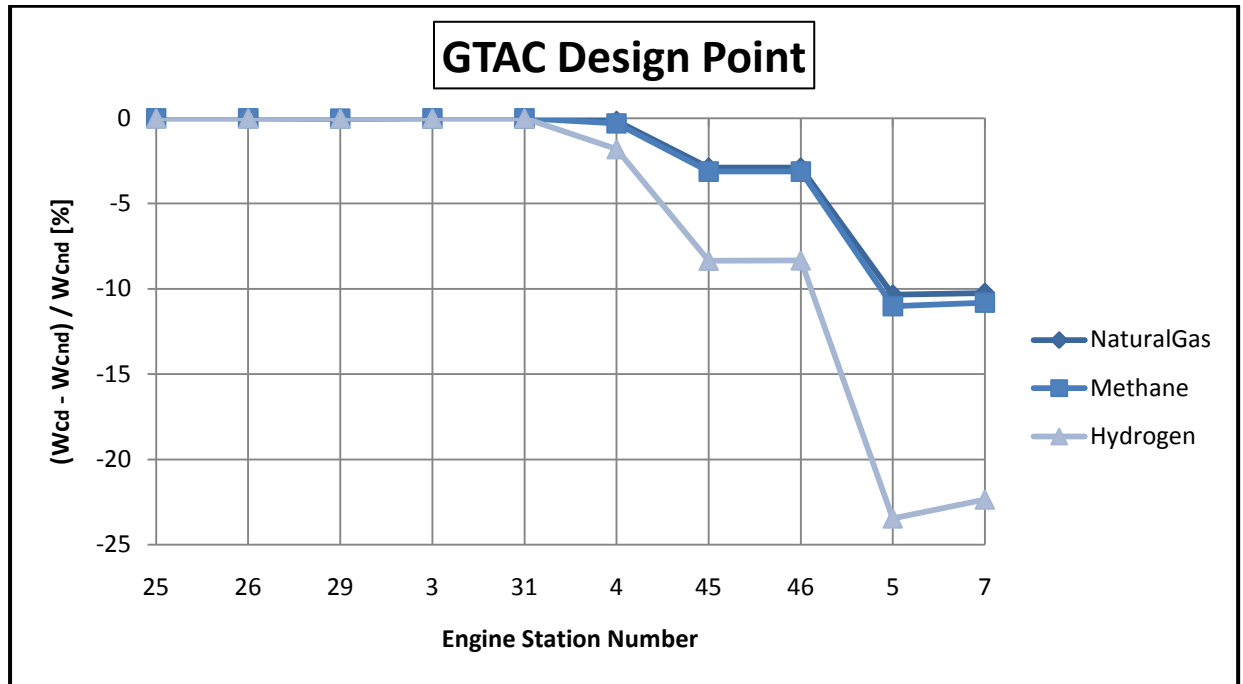
Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται είναι τα ίδια όπως το πρώτο deck δηλαδή: Jet-A(g), Diesel(g), JP-4, JP-5, Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο λαμβάνοντας υπόψη τη χημική διάσταση και συγκρίνονται στο σημείο σχεδίασης με βάση το μοντέλο Jet-A(g) που αγνοεί την επίδραση της χημικής διάστασης.

Επίδραση χημικής διάστασης και σύνθεσης καυσίμου σε ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου και σε βασικές παραμέτρους επιδόσεων της μηχανής.

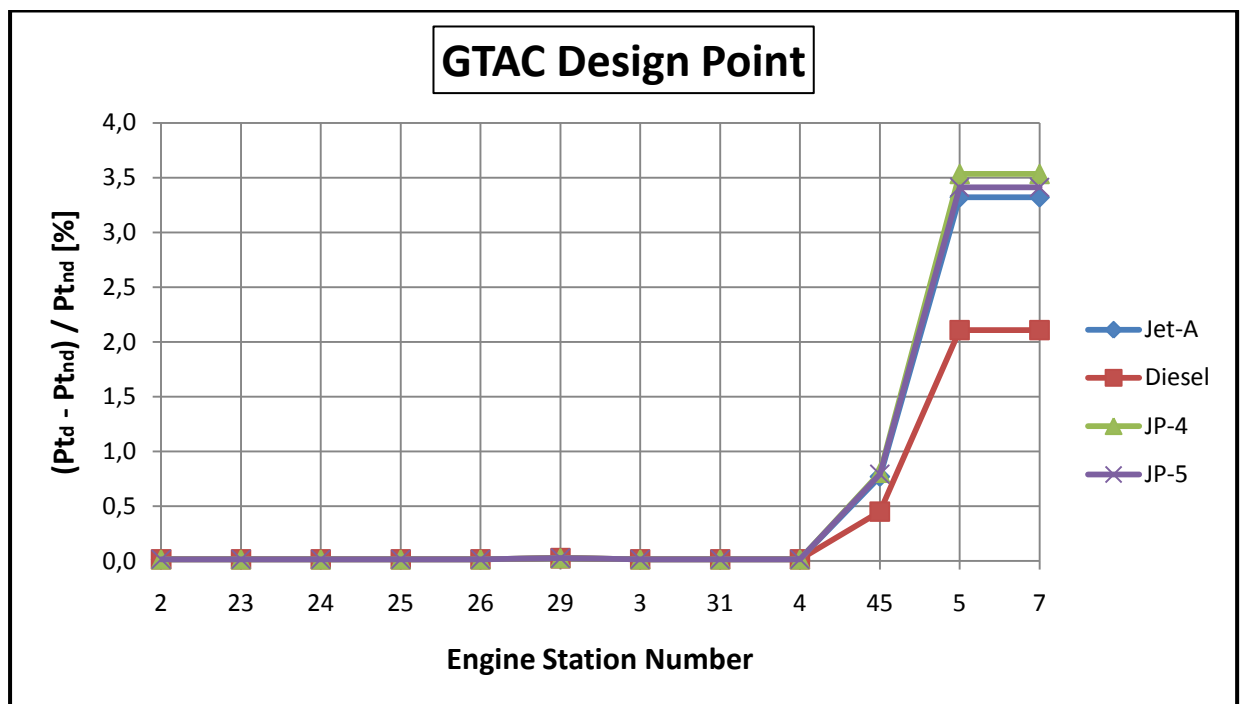
Οι πρώτοι υπολογισμοί είχαν σκοπό να δείξουν την επίδραση που έχουν παράμετροι όπως η χημική διάσταση και η σύνθεση του καυσίμου που οξειδώνεται στο θάλαμο καύσης, σε διάφορα χαρακτηριστικά του εργαζόμενου μέσου όπως η ανοιγμένη παροχή μάζας, η πίεση και η θερμοκρασία στις διάφορες θέσεις της επανασχεδιασμένης μηχανής.



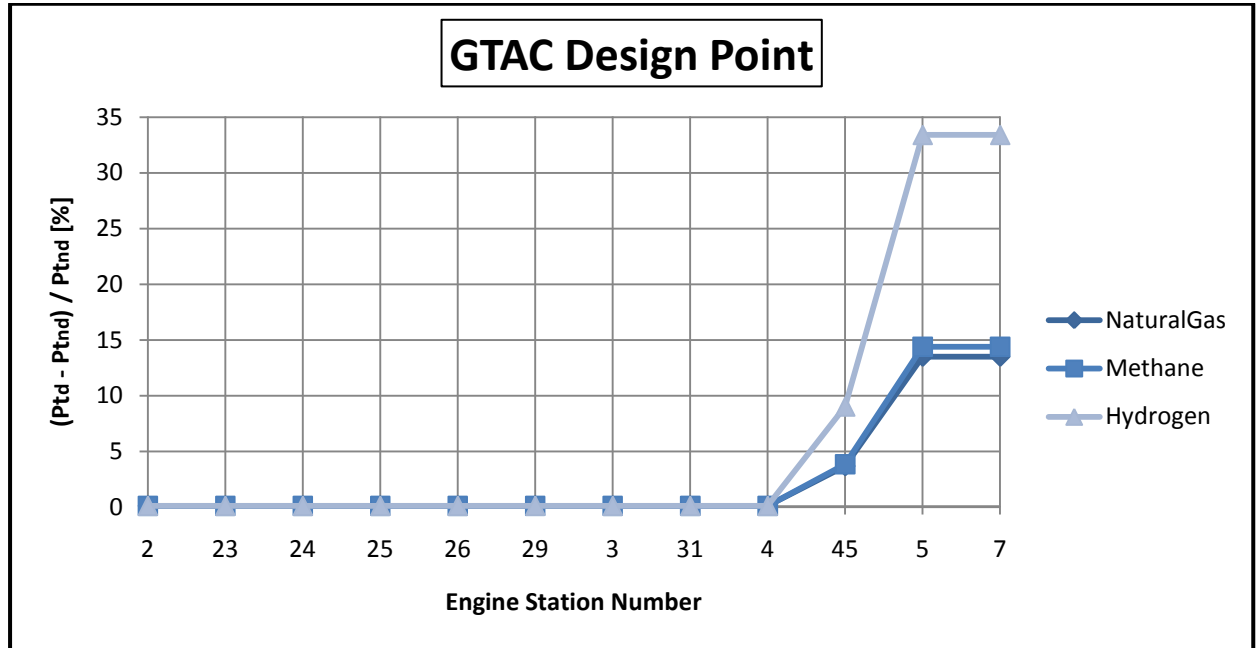
Σχήμα 4.28α: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



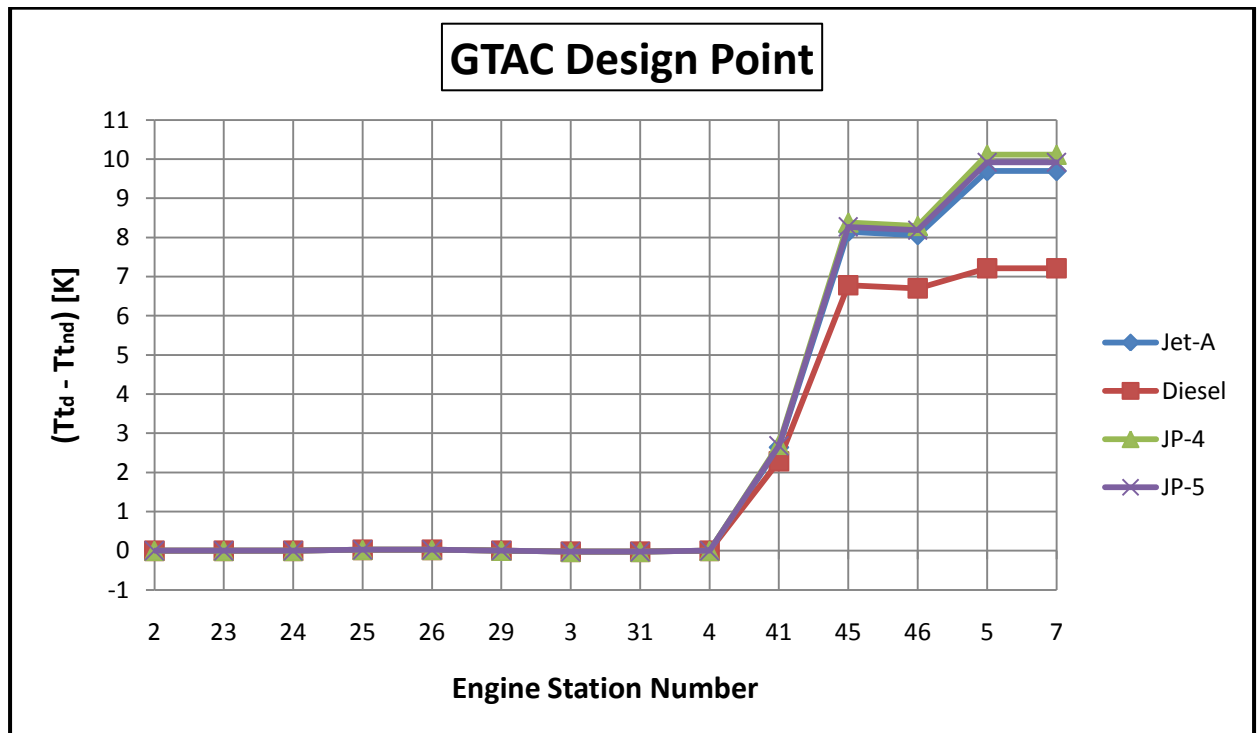
Σχήμα 4.28β: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



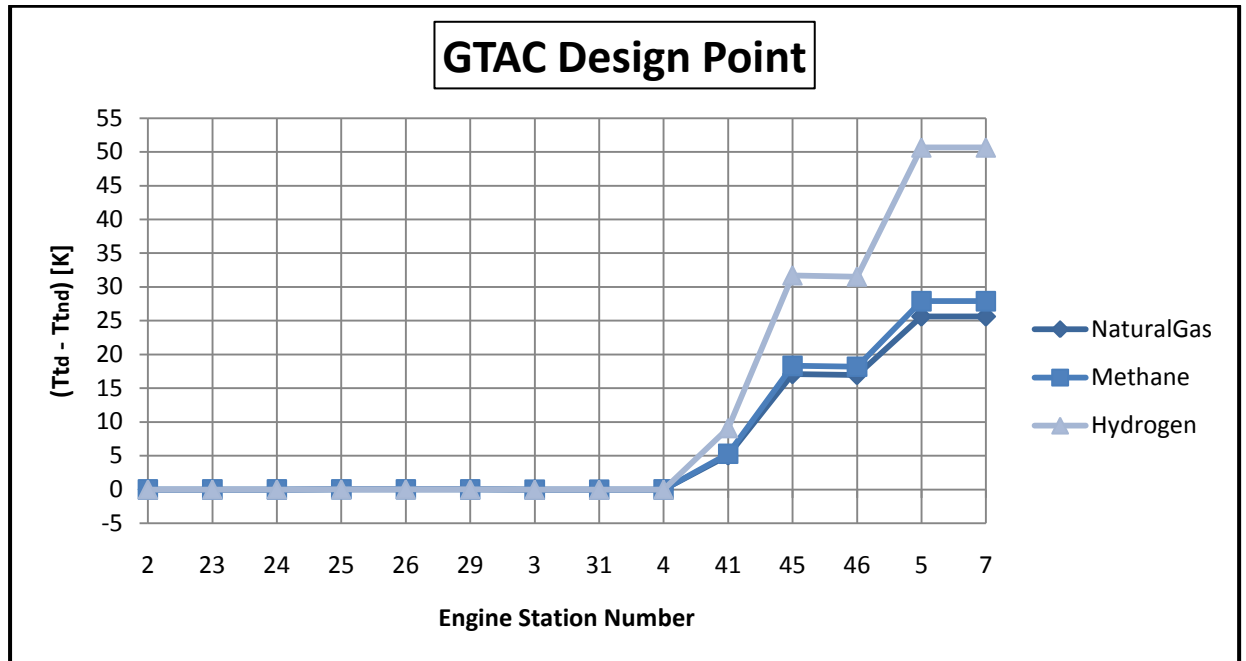
Σχήμα 4.29α: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.29β: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

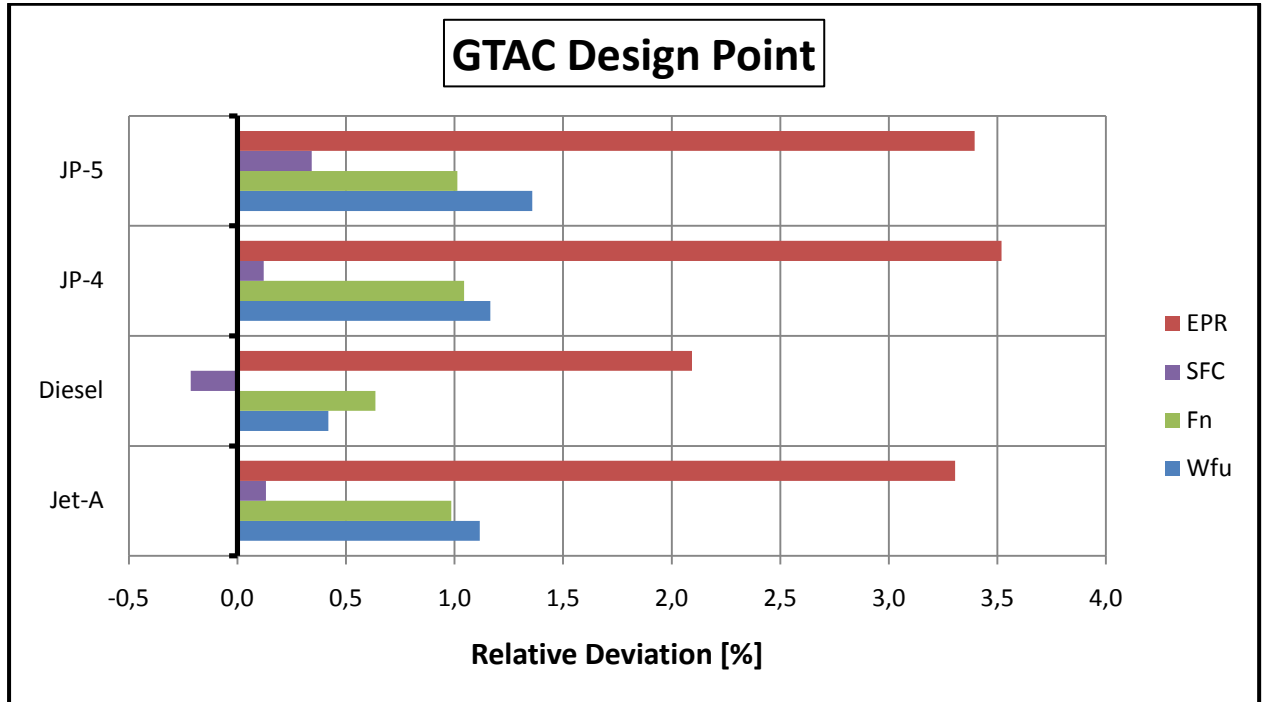


Σχήμα 4.30α: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

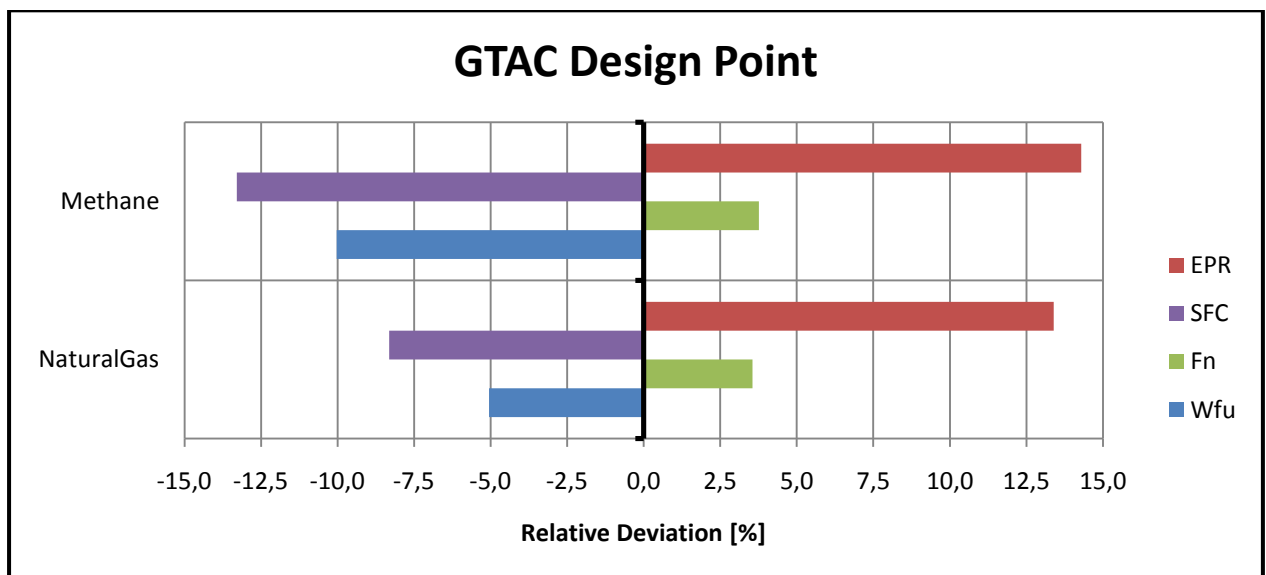


Σχήμα 4.30β: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

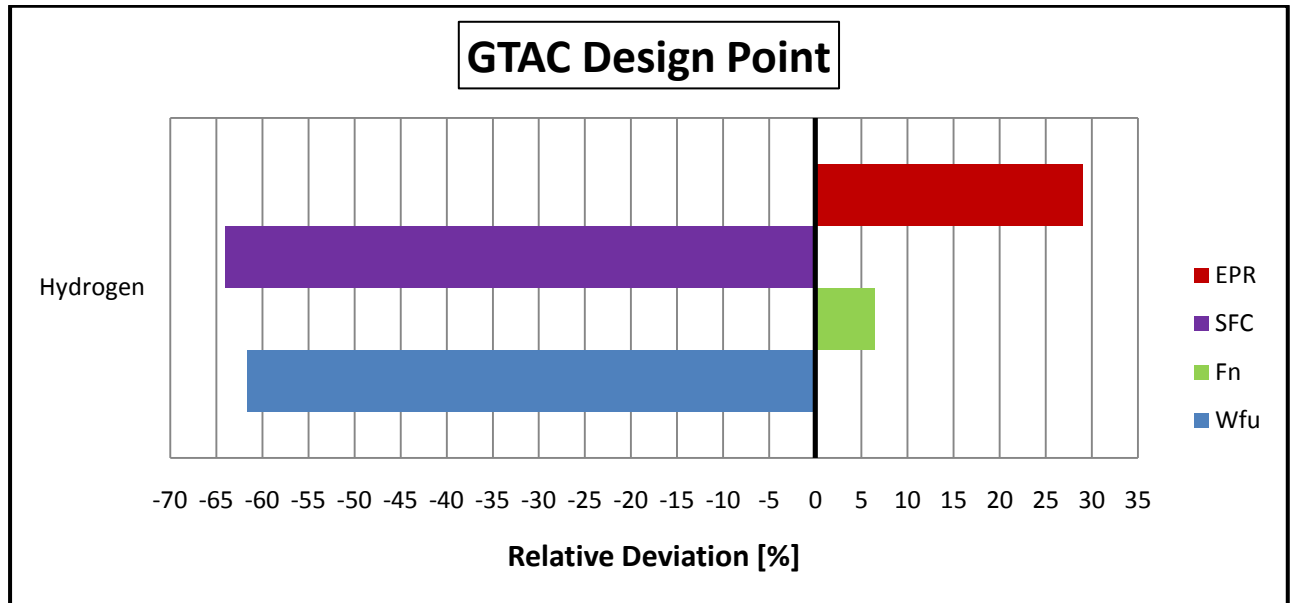
Οι υπολογισμοί στη συνέχεια είχαν σκοπό να δείξουν την επίδραση που έχει η χημική διάσταση και η σύνθεση του καυσίμου σε βασικές παραμέτρους επιδόσεων της μηχανής όπως είναι ο ολικός λόγος συμπίεσης της μηχανής (EPR), η ειδική κατανάλωση καυσίμου SFC, η κατανάλωση καυσίμου W_{fu} και η καθαρή ώση F_n που παράγεται από τη μηχανή στο σημείο σχεδίασης. Επίσης μελετήθηκαν και μεγέθη που έχουν να κάνουν με το θερμό ακροφύσιο όπως η διατομή του A8, ο αριθμός Mach M8 και η μικτή ώση F_{g8} . Τα αποτελέσματα φαίνονται στα επόμενα σχήματα:



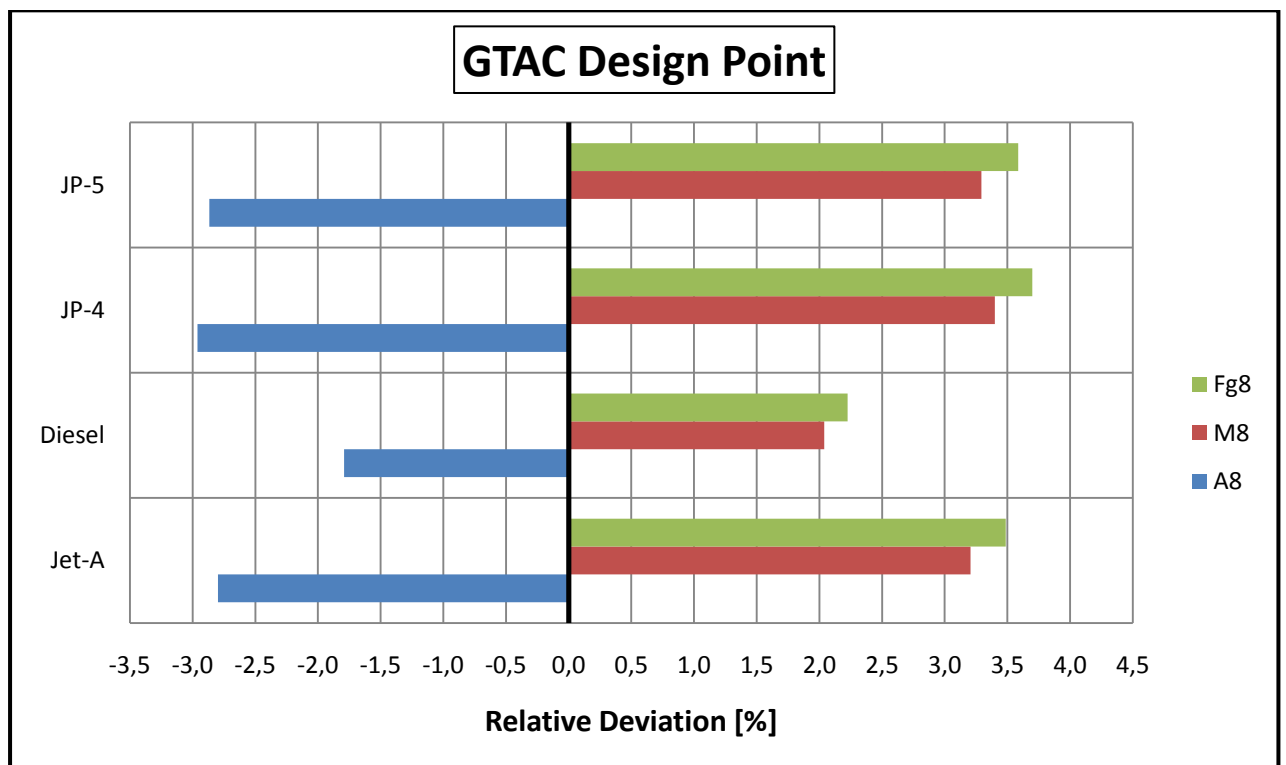
Σχήμα 4.31α: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



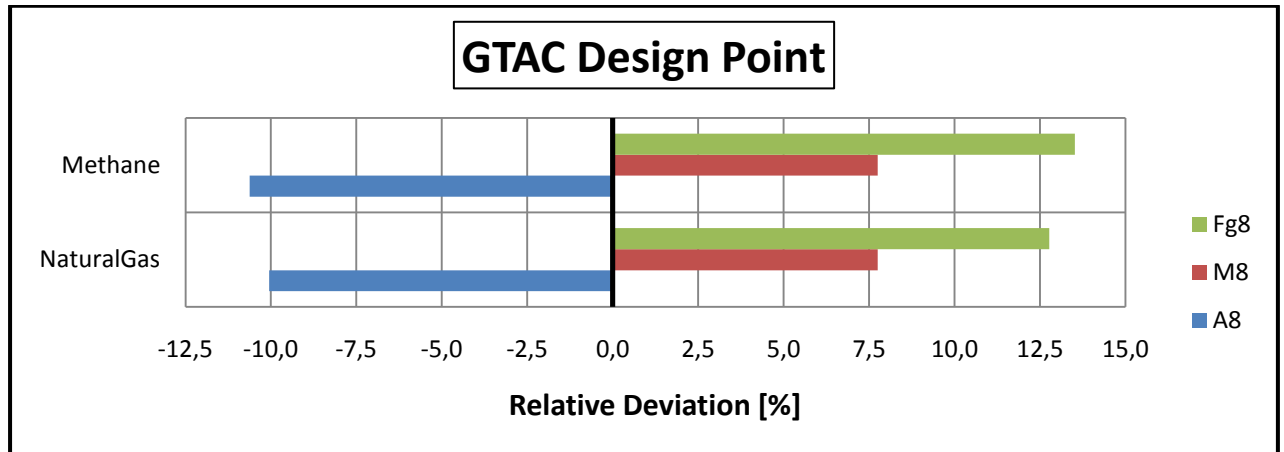
Σχήμα 4.31β: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο και Μεθάνιο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



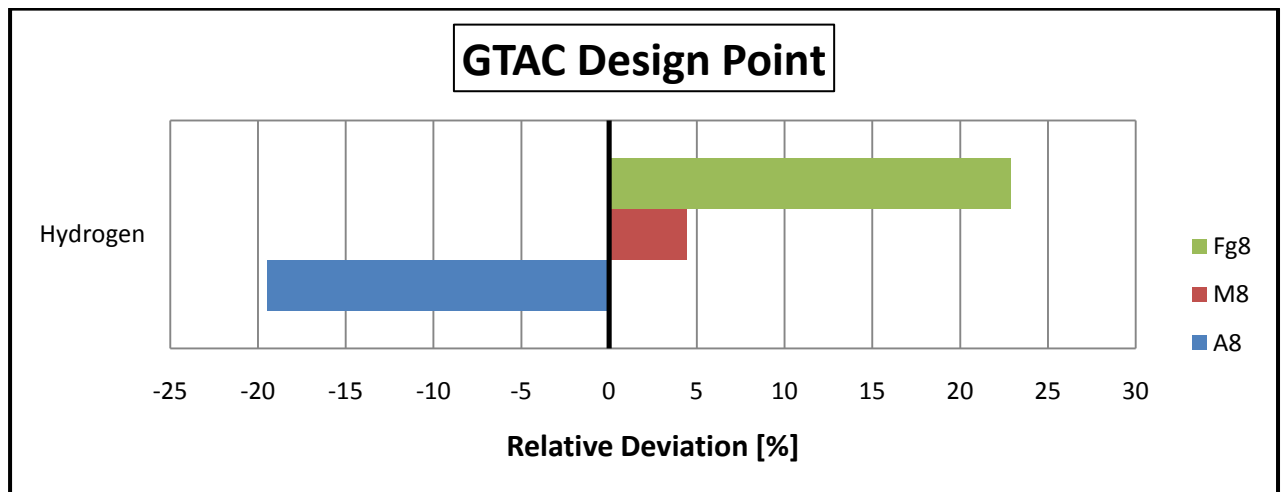
Σχήμα 4.31γ: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για το μοντέλο Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.32α: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.32β: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο και Μεθάνιο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.32γ: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής για το μοντέλο Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

Σ' αυτό το σημείο πρέπει πάλι να τονίσουμε ότι οι παραπάνω διαφορές οφείλονται τόσο στην αλλαγή του μοντέλου της καύσης (no dissociation → dissociation) όσο και στην αλλαγή της σύνθεσης του καυσίμου (Jet-A → JP-5 → Φυσικό αέριο → Υδρογόνο κλπ.), με εξαίρεση βέβαια για τη 2^η περίπτωση το Jet-A(g) dissociation, καθώς οι συγκρίσεις γίνονται με βάση το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation.

Κάποια βασικά συμπεράσματα που μπορούν να εξαχθούν από τα παραπάνω διαγράμματα για την επανασχεδιασμένη μηχανή είναι τα εξής:

- Άμα επικεντρώσουμε το ενδιαφέρον μας στην επίδραση που έχει η μοντελοποίηση της καύσης με πλήρης χημική διάσταση σε σχέση με την υπόθεση της σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης παρατηρούμε ότι οι αποκλίσεις ανάμεσα στα μοντέλα Jet-A(g) dissociation και Jet-A(g) no dissociation φτάνουν:
 - το 2.5%, 3.3% και τους 10K για την ανοιγμένη παροχή (σχήμα 4.28α), ολική πίεση (σχήμα 4.29α) και θερμοκρασία (σχήμα 4.30α) αντίστοιχα του εργαζόμενου μέσου
 - το 3.3% για τον ολικό λόγο πίεσης της μηχανής (EPR) και το 1% για την καθαρή ώση και την κατανάλωση καυσίμου της μηχανής (σχήμα 4.31α)
 - το 2.8%, 3.2% και 3.5% για το εμβαδόν, τον αριθμό Mach και την μικτή ώση του θερμού ακροφυσίου (σχήμα 4.32α)

Οι διαφορές αυτές είναι σημαντικές και επομένως δεν θα πρέπει να αμελείται η επίδραση της χημικής διάστασης ειδικά όταν κάνουμε υπολογισμούς σχεδίασης για το θερμό κομμάτι της μηχανής.

- Παρατηρούμε ότι τα υγρά καύσιμα Jet-A, Diesel, JP-4 και JP-5 που έχουν σχεδόν ίδιο λόγο ατόμων H/C στον μοριακό τους τύπο (περίπου 1.8-1.94) παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά μεταξύ τους (σχήματα 4.28α - 4.32α). Ωστόσο το μοντέλο Diesel(g) dissociation βγάζει αποτελέσματα σχεδίασης πιο κοντά στο Jet-A(g) no dissociation απ' ό,τι το Jet-A(g) dissociation με τα μοντέλα JP-5 dissociation και JP-4 dissociation ν' ακολουθούν. Το γεγονός αυτό ήταν αναμενόμενο από την μελέτη που έγινε με το πρώτο deck και έτσι επιβεβαιώνονται οι εκτιμήσεις μας.
- Πολύ μεγαλύτερες είναι οι αποκλίσεις για τα αέρια καύσιμα με το Φυσικό αέριο ωστόσο να έχει μικρότερες αποκλίσεις από το Jet-A no dissociation για το σημείο σχεδίασης απ' ό,τι το Μεθάνιο, γεγονός που επίσης επαληθεύει τους υπολογισμούς που κάναμε με το πρώτο deck. Για το Υδρογόνο οι διαφορές φτάνουν:

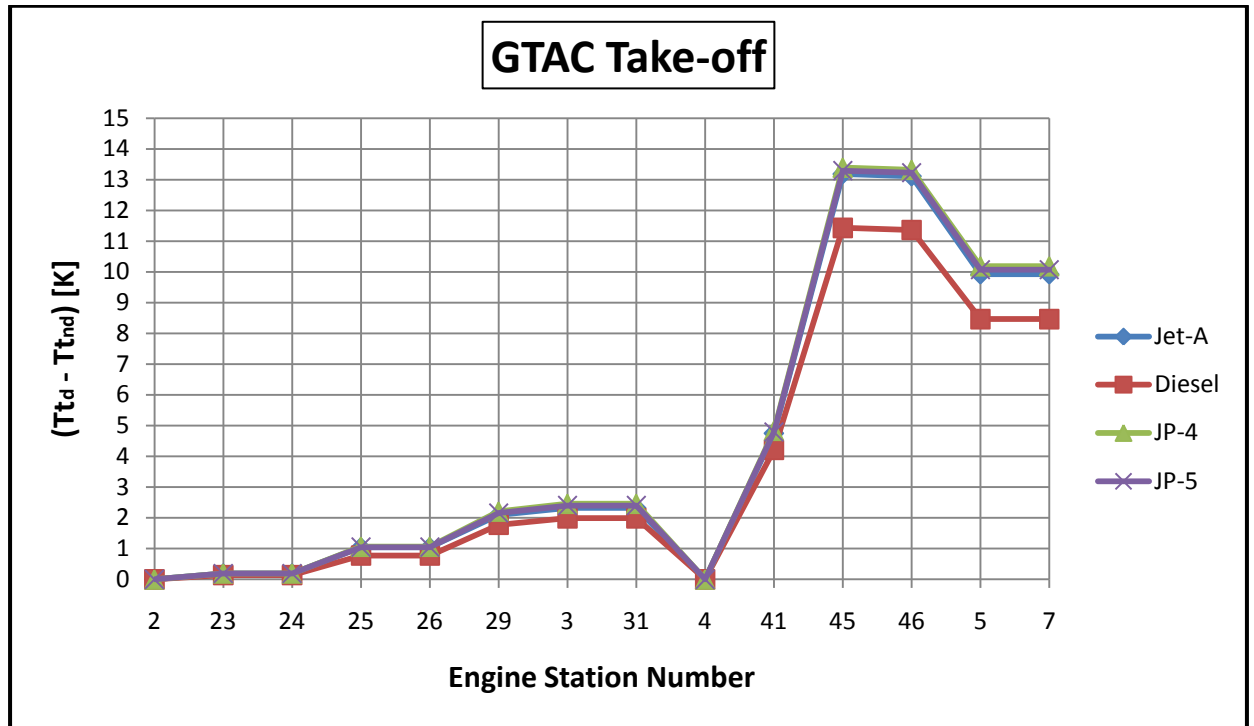
- το 24%, 33% και 50K για την παροχή, πίεση και θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου (σχήματα 4.28β - 4.30β)
- το 33%, 64%, 7.5%, και 61% για τον ολικό λόγο πίεσης της μηχανής, την ειδική κατανάλωση καυσίμου, την καθαρή ώση και την κατανάλωση καυσίμου (σχήμα 4.31γ)
- το 22%, 7.8% και 27% για το εμβαδόν, τον αριθμό Mach και την μικτή ώση του θερμού ακροφυσίου (σχήμα 4.32γ)

Ενδεικτικά για το φυσικό αέριο οι διαφορές αυτές φτάνουν:

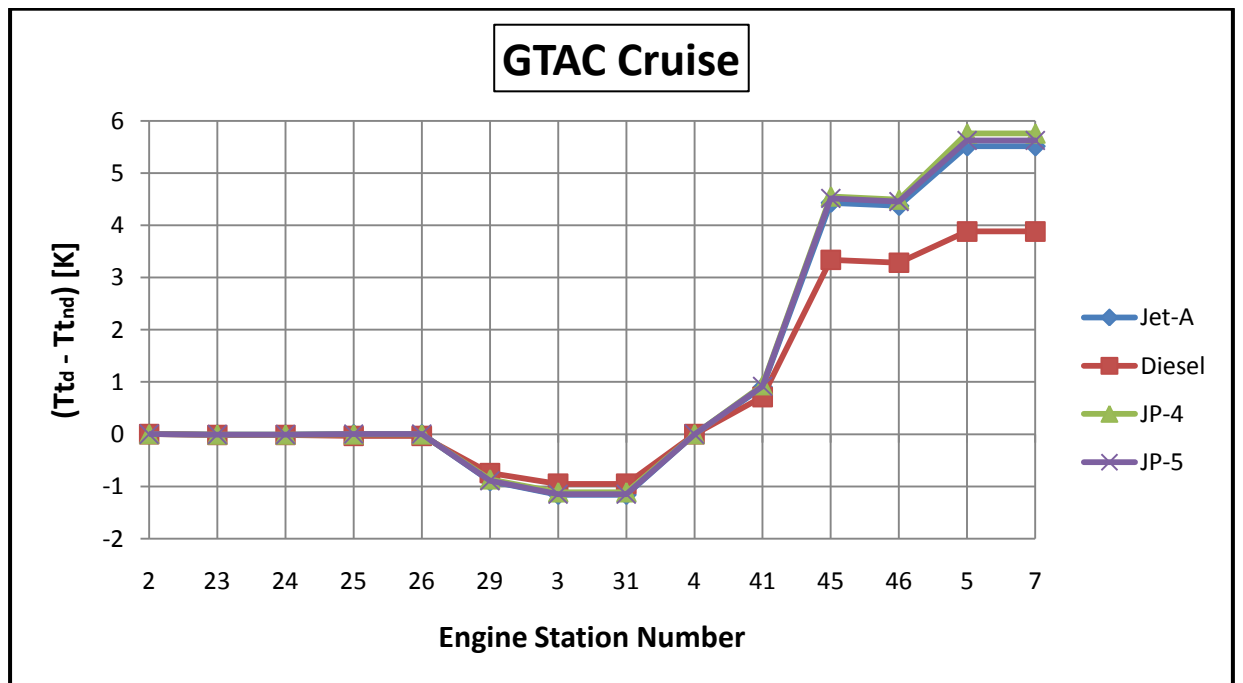
- το 10%, 13% και 26K για την παροχή, πίεση και θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου (σχήματα 4.28β - 4.30β)
- το 13.5%, 8.5%, 3.5%, και 5% για τον ολικό λόγο πίεσης της μηχανής, την ειδική κατανάλωση καυσίμου, την καθαρή ώση και την κατανάλωση καυσίμου (σχήμα 4.31β)
- το 10%, 8% και 13% για το εμβαδόν, τον αριθμό Mach και την μικτή ώση του θερμού ακροφυσίου (σχήμα 4.32β)

Επομένως ειδικά για τα καύσιμα αυτά που έχουν εντελώς διαφορετική σύνθεση (διαφορετικός λόγος H/C) και αισθητά μεγαλύτερη θερμογόνο δύναμη από τα συμβατικά καύσιμα είναι εντελώς λανθασμένη η χρησιμοποίηση ενός μοντέλου που αγνοεί την επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου και της διάστασης όπως το Jet-A(g) no dissociation και θα πρέπει να αναπαράγουμε ακριβείς πίνακες για την μοντελοποίηση τους.

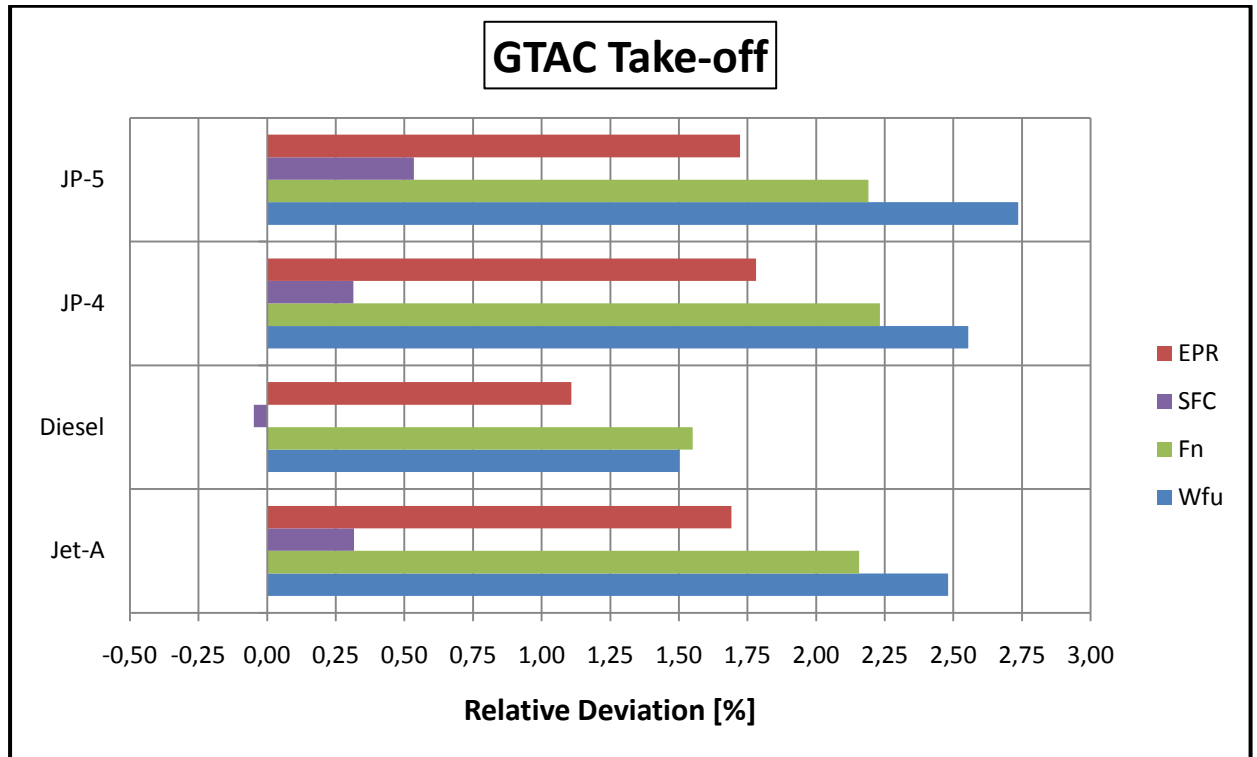
Στη συνέχεια αφού έχουμε σχεδιάσει την μηχανή κάνουμε τις υπολογισμούς μας για τα δύο σημεία λειτουργίας κατά την απογείωση και την πλεύση. Ενδεικτικά φαίνονται στα ακόλουθα σχήματα οι αποκλίσεις των ολικών θερμοκρασιών και των παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής που εξετάστηκαν και παραπάνω στο σημείο σχεδίασης για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5, λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της πλήρους διάστασης (dissociation models), από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation.



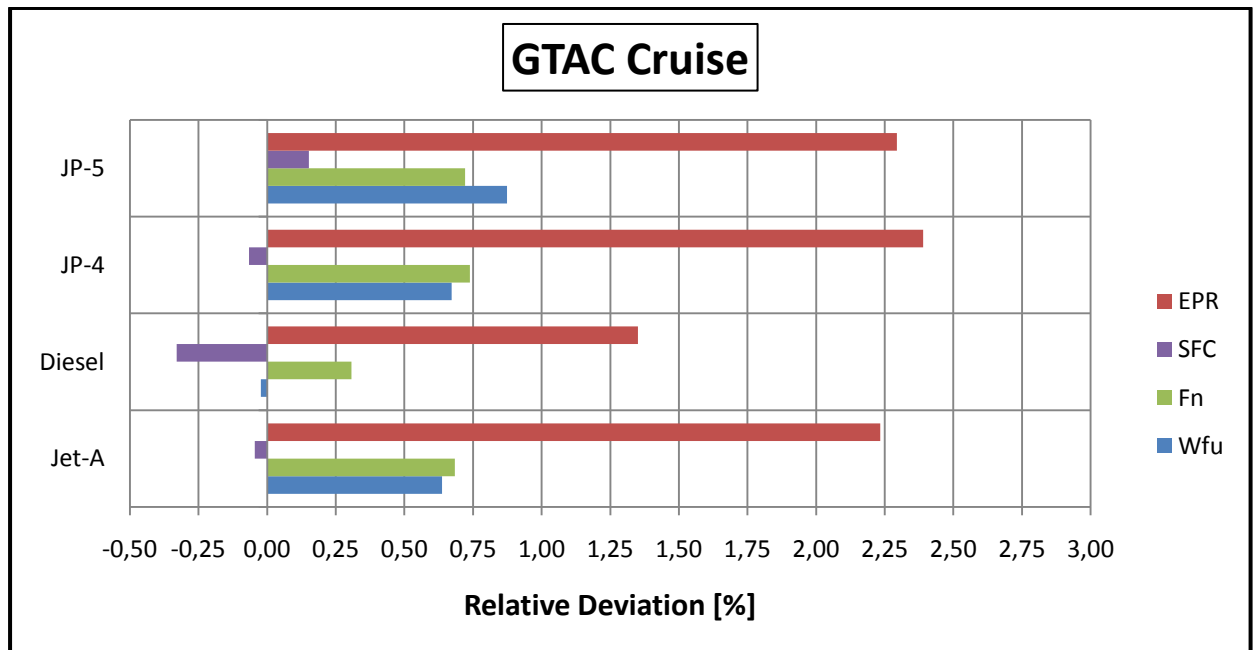
Σχήμα 4.33α: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο απογείωσης.



Σχήμα 4.33β: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο πλεύσης.



Σχήμα 4.34α: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο απογείωσης.



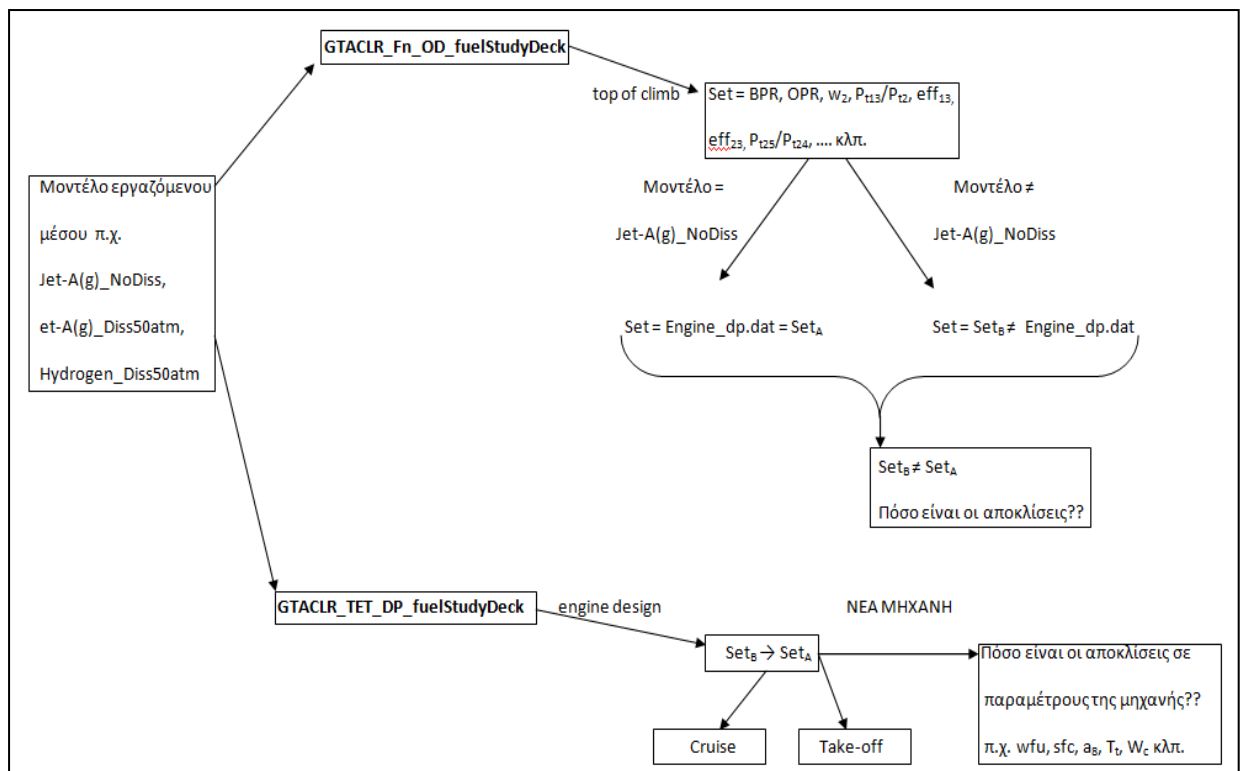
Σχήμα 4.34β: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής με τα μοντέλα Jet-A(g), Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο πλεύσης.

Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε ότι η απόκλιση από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation για την ολική θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου φτάνει τους 13K κατά την απογείωση και τους 5.5K κατά την πλεύση, λαμβάνοντας υπόψη το μοντέλο του Jet-A(g) dissociation.

Επίσης οι διαφορές αυτές για τα ίδια μοντέλα φτάνουν το 2.2%, 2.5% και 0.3% για την καθαρή ώση, κατανάλωση καυσίμου και ειδική κατανάλωση καυσίμου κατά την απογείωση και 0.7%, 0.6% και 0.1% κατά την πλεύση.

Οι αποκλίσεις δηλαδή είναι μεγαλύτερες για το σημείο απογείωσης από του σημείου σχεδίασης ενώ του σημείου πλεύσης είναι ακόμα μικρότερες. Αυτό είναι αναμενόμενο καθώς κατά την απογείωση εμφανίζονται οι μεγαλύτερες θερμοκρασίες που φτάνουν τους 2000K σε αντίθεση με την πλεύση όπου οι θερμοκρασίες με δυσκολία ξεπερνούν τους 1500K. Επιβεβαιώνεται και εδώ το γεγονός ότι όσο αυξάνει η θερμοκρασία τα φαινόμενα χημικής διάστασης γίνονται πιο έντονα.

Συνοπτικά η διαδικασία που ακολουθήθηκε με τα δύο deck του κινητήρα GTAC φαίνεται στο ακόλουθο διάγραμμα.



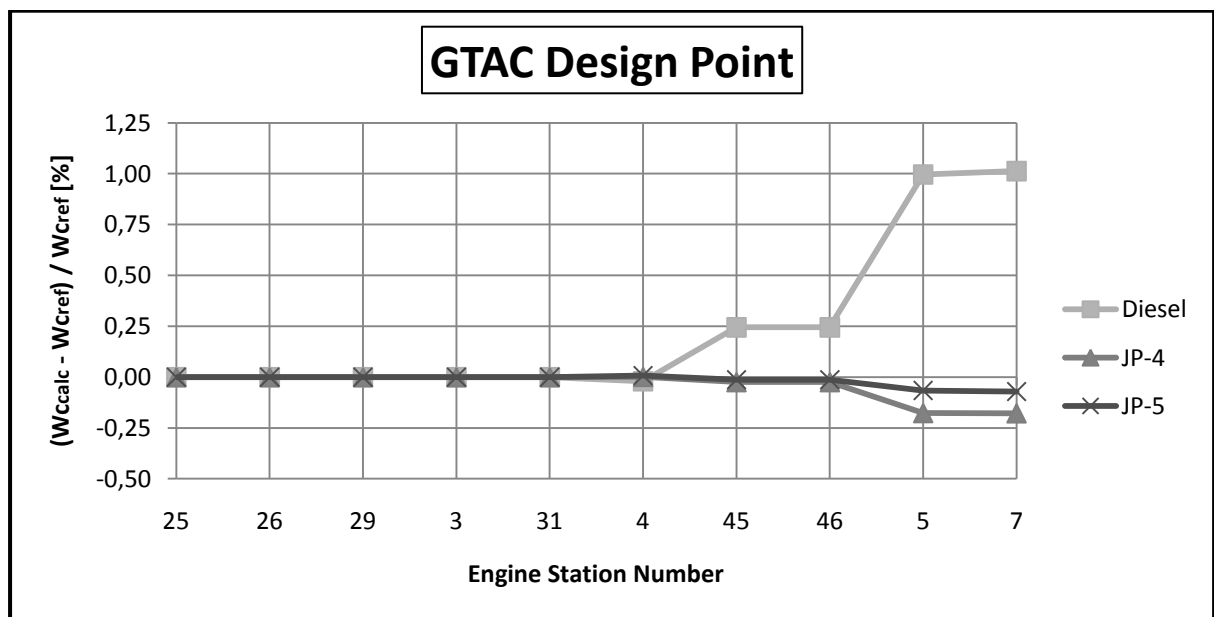
Σχήμα 4.35: Σχηματική απεικόνιση της μελέτης που έγινε με τα δύο deck του κινητήρα GTAC.

Επίδραση μόνο της σύνθεσης καυσίμου σε ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου σε διάφορες θέσεις καθώς και σε βασικές παραμέτρους επιδόσεων της μηχανής.

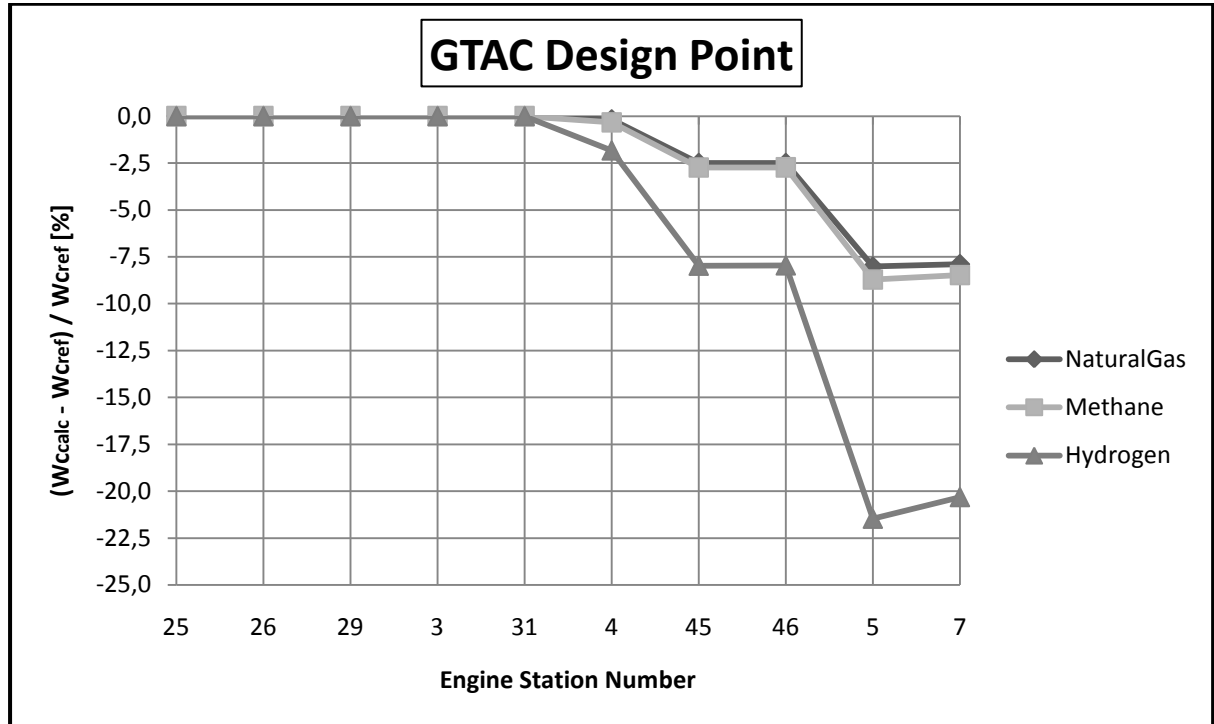
Στην πραγματικότητα σε μια μηχανή συμβαίνει διάσταση των προϊόντων της καύσης και η σύσταση του καυσαερίου κάθε άλλο παρά σταθερή μπορεί να θεωρηθεί καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία. Επίσης από την παραπάνω ανάλυση αποδείχθηκε ότι η επίδραση της χημικής διάστασης είναι ιδιαίτερα σημαντική στους υπολογισμούς σχεδίασης της μηχανής.

Επομένως στην ενότητα αυτή έγινε μια μελέτη για την επίδραση που έχει μόνο η σύνθεση των διαφόρων καυσίμων όπως το Diesel(g), JP-4, JP-5, Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο, με τη θεώρηση της πλήρους διάστασης (dissociation models), στην επανασχεδίαση της μηχανής GTAC σε σχέση με τη σχεδίαση που προκύπτει από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation. Υποθέτουμε δηλαδή ότι οι τιμές του πίνακα 4.2 για το σημείο σχεδίασης στην περίπτωση αυτή ταυτίζονται με τις τιμές που προκύπτουν από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation.

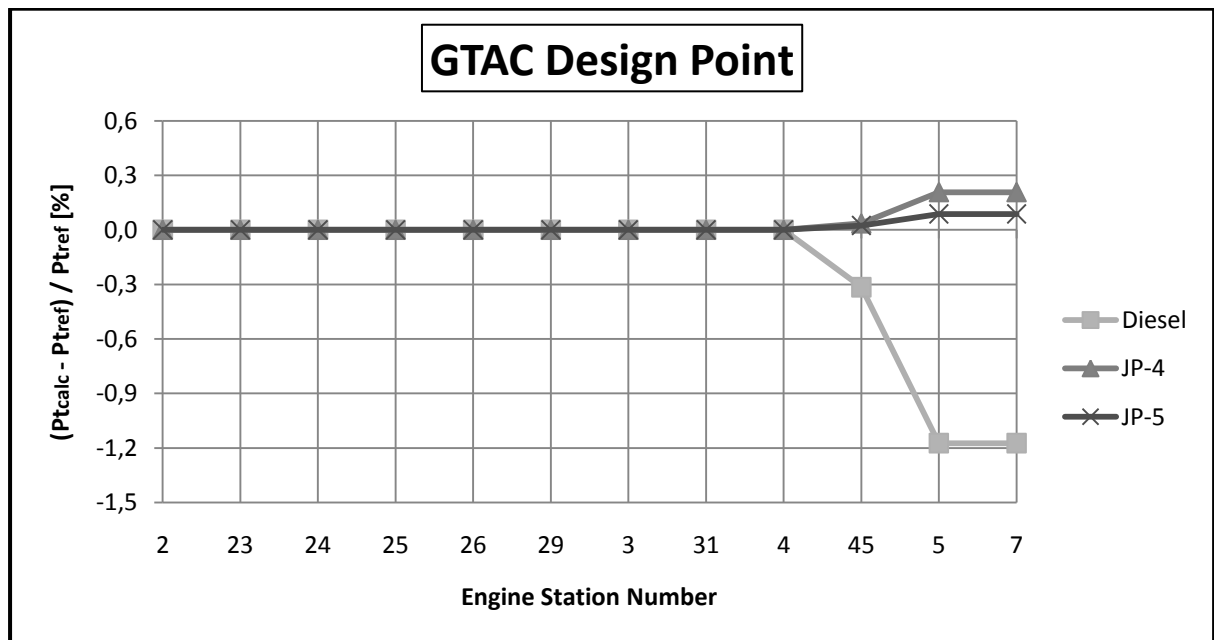
Οι παράμετροι που μελετήθηκαν είναι όπως και στην παραπάνω ανάλυση η παροχή, πίεση και θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου καθώς και βασικοί παράμετροι που σχετίζονται με τις επιδόσεις της μηχανής και το θερμό ακροφύσιο. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα ακόλουθα διαγράμματα.



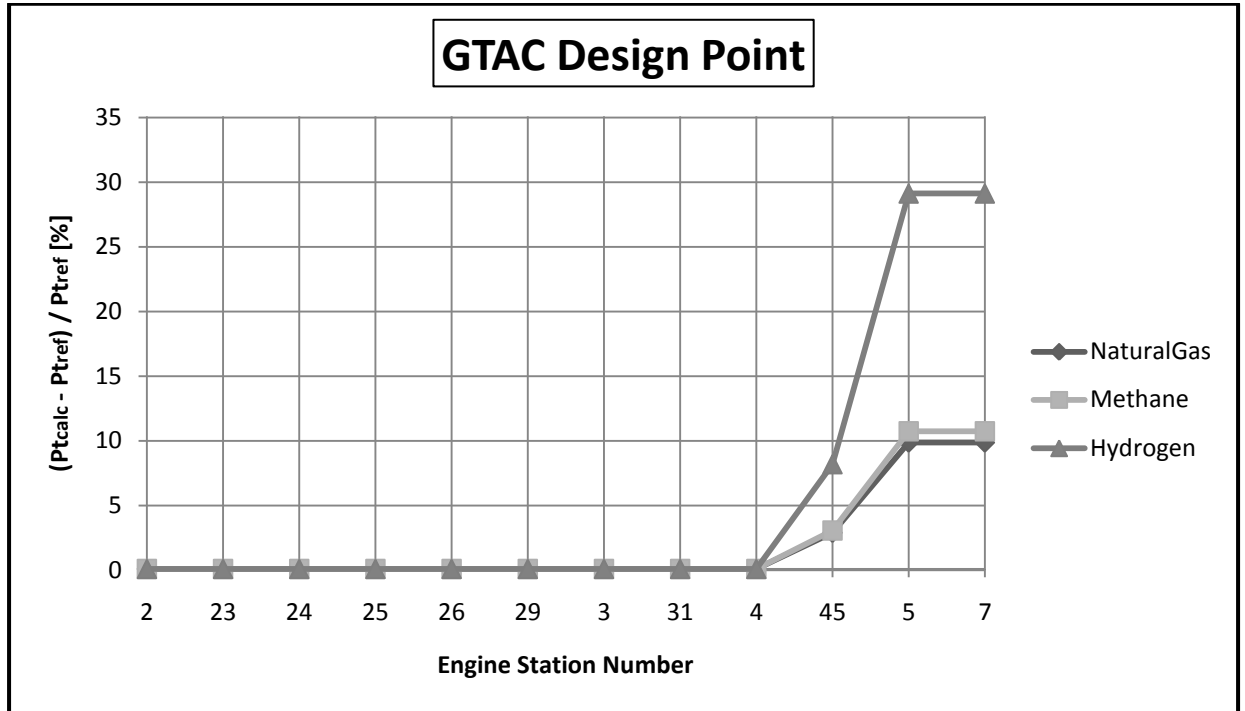
Σχήμα 4.36α: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



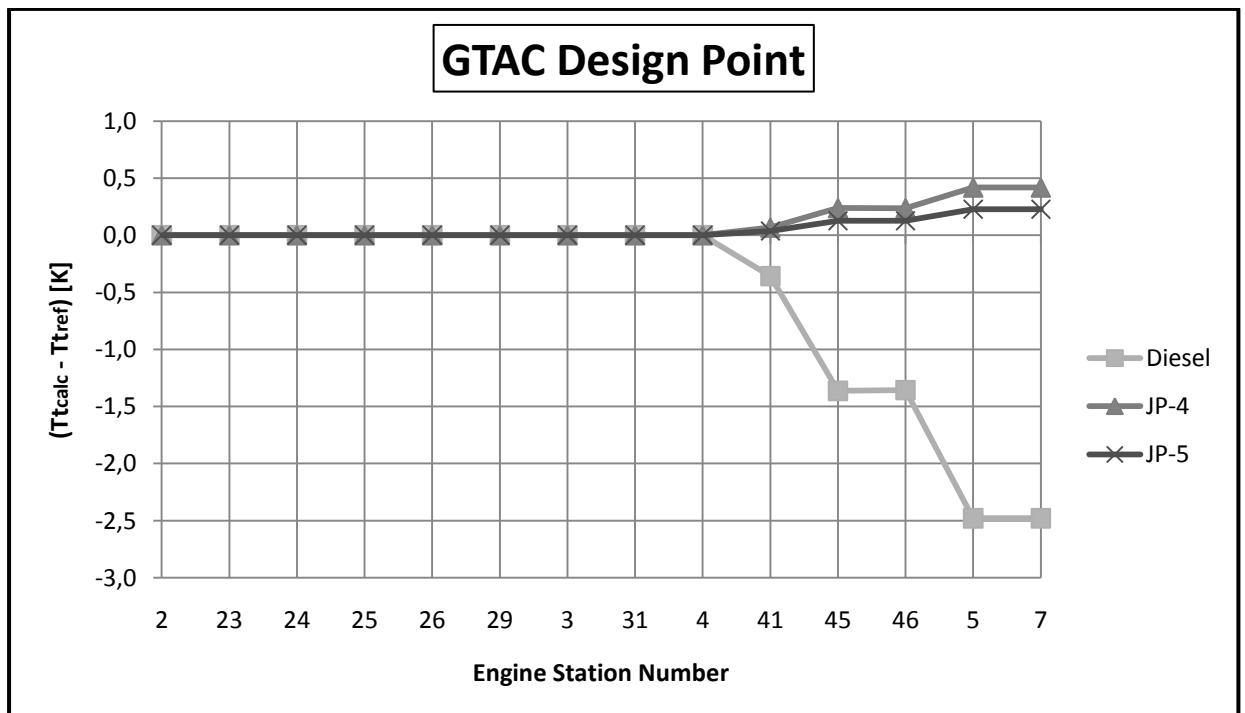
Σχήμα 4.36β: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



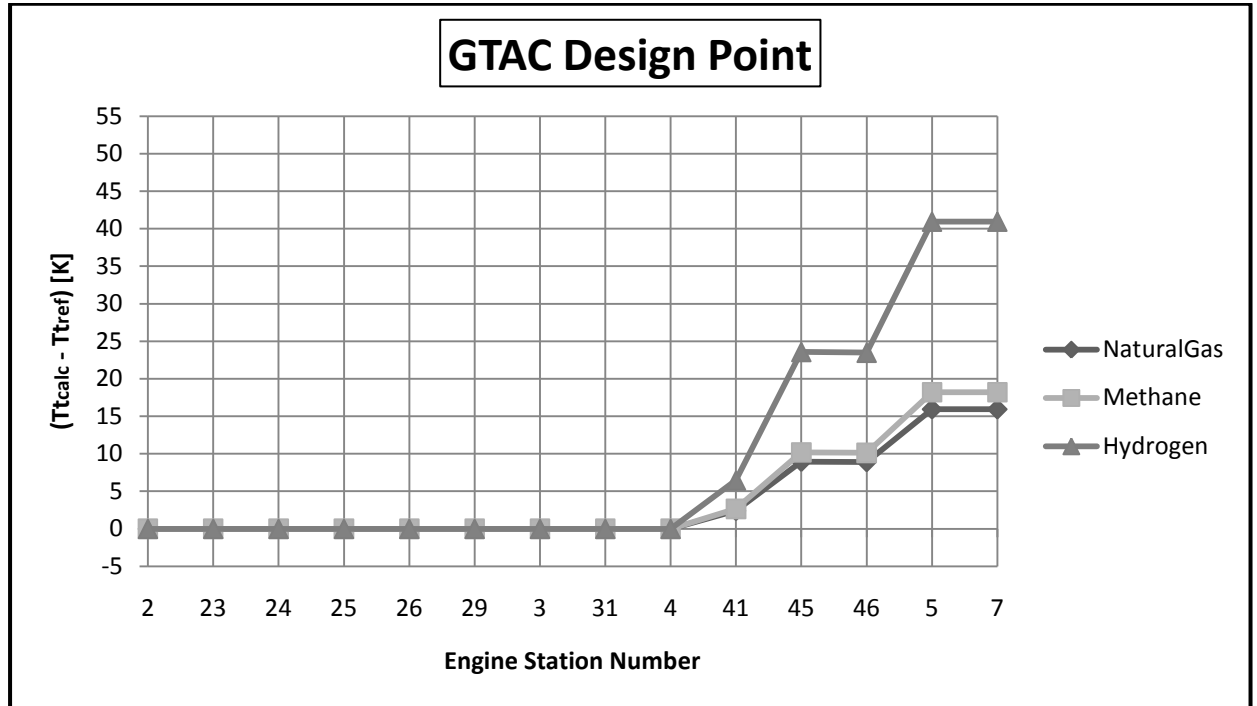
Σχήμα 4.37α: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



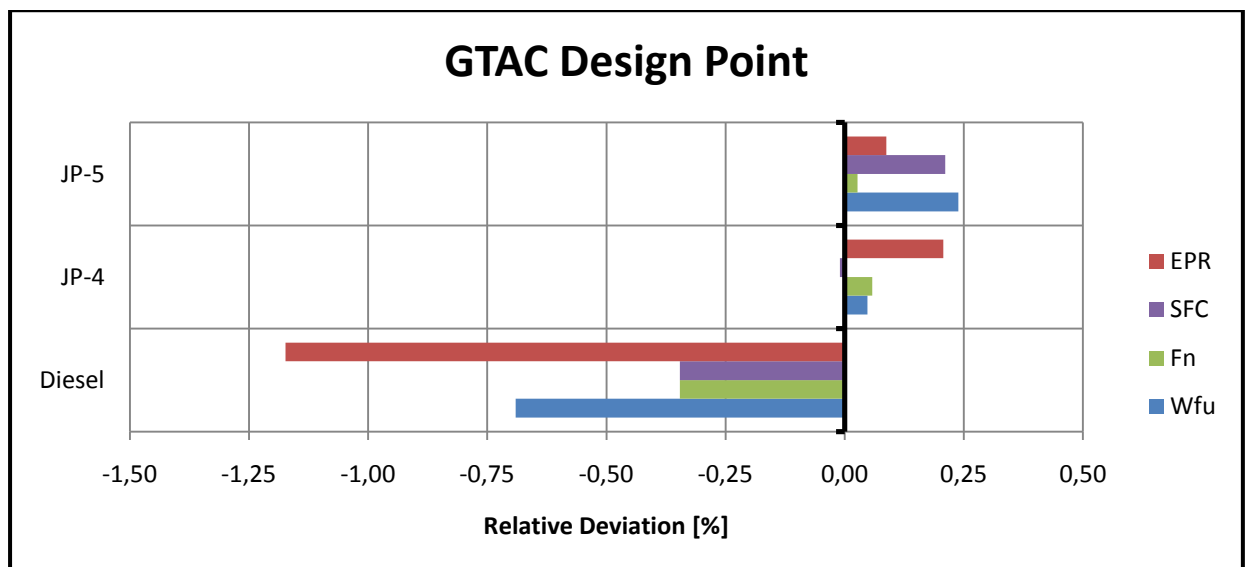
Σχήμα 4.37β: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



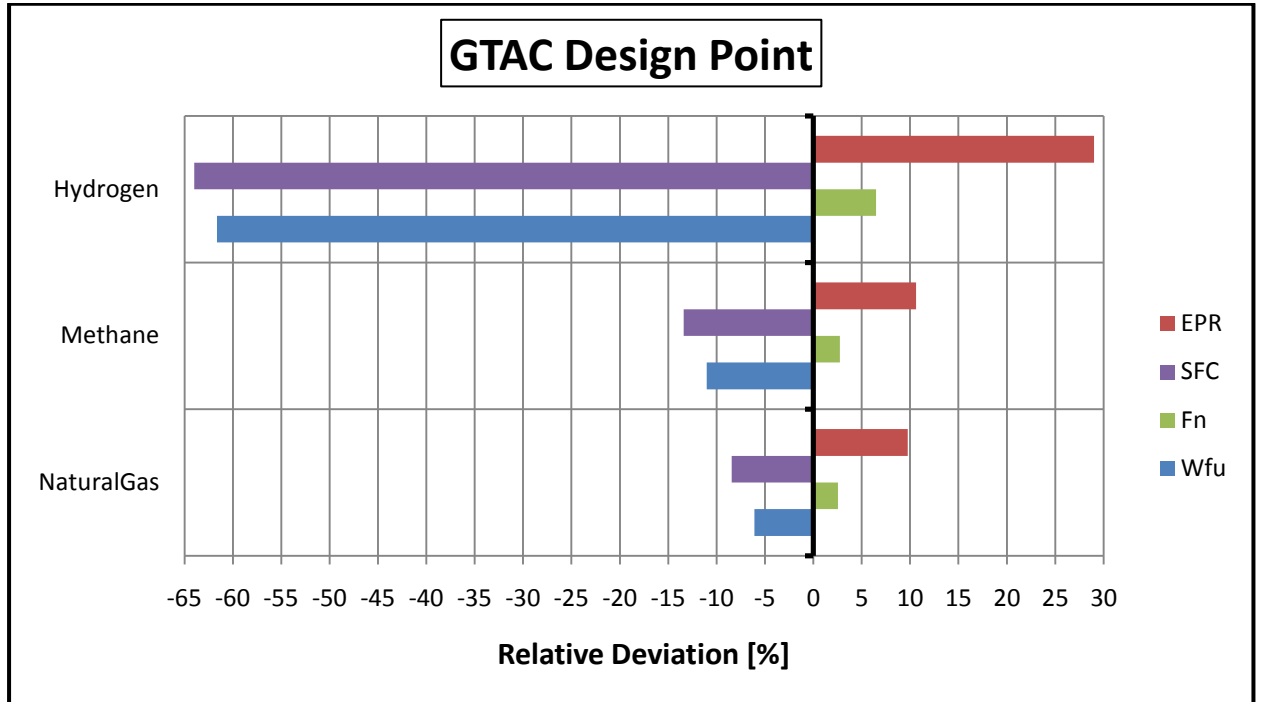
Σχήμα 4.38α: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



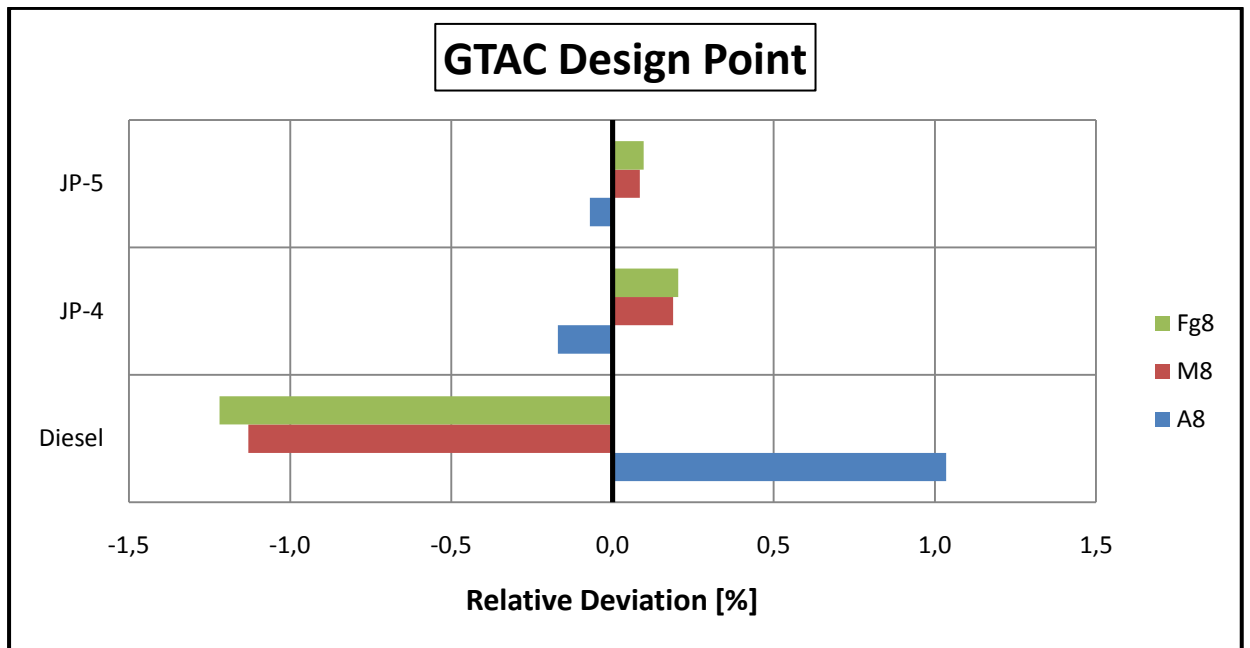
Σχήμα 4.38β: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



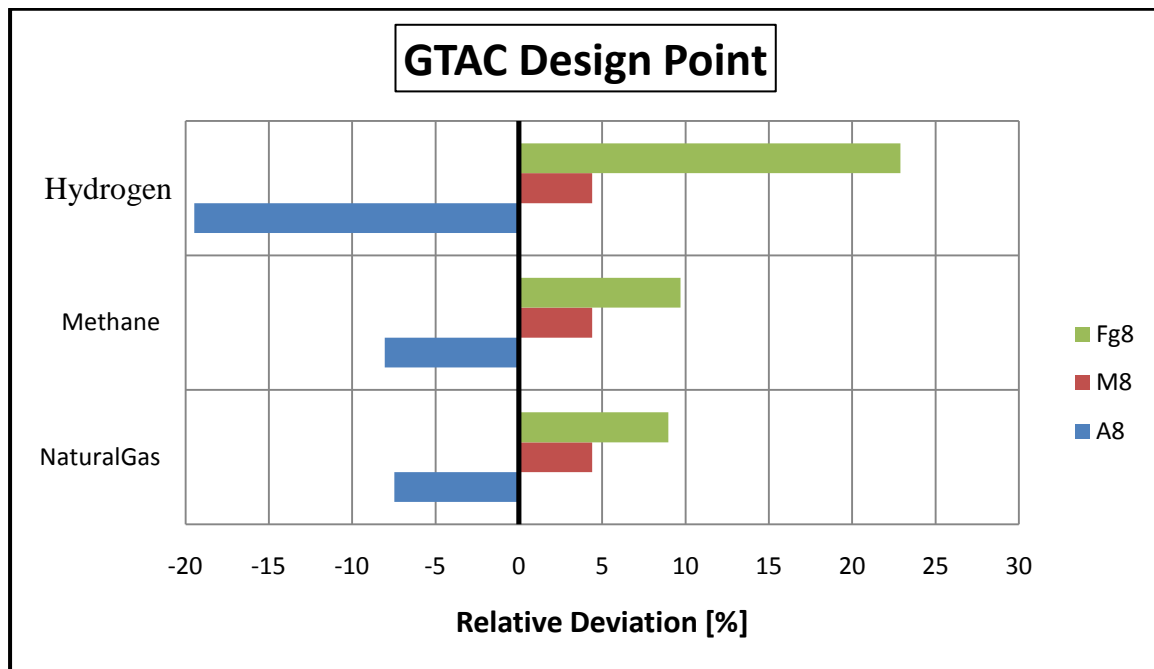
Σχήμα 4.39α: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.39β: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επιδόσεων της μηχανής για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.40α: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων του θερμού ακροφύσιου για τα μοντέλα Diesel(g), JP-4 και JP-5 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 4.40β: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων του θερμού ακροφύσιου για τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε ότι:

- τα καύσιμα JP-4 και JP-5 προκαλούν πολύ μικρές διαφορές (< 0.25%) στην επανασχεδίαση της μηχανής σε σχέση με το Jet-A(g)
- το Diesel(g) εισάγει αποκλίσεις που σε αρκετές περιπτώσεις ξεπερνούν το 1%
- τα αέρια καύσιμα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο εξακολουθούν να προκαλούν μεγάλες αποκλίσεις (>5%) από τη σχεδίαση με το Jet-A(g)

Το συμπέρασμα από την παραπάνω ανάλυση είναι ότι η μηχανή GTAC που θα σχεδιαστεί κάθε φορά με βάση τα καύσιμα Jet-A(g), JP-4 και JP-5 θα έχει σχεδόν ταυτόσημα χαρακτηριστικά. Δηλαδή θα μπορούσε να γίνει η προκαταρκτική σχεδίαση μιας μηχανής που θα χρησιμοποιεί για καύσιμο JP-4 και JP-5 με το μοντέλο Jet-A(g) dissociation και εναλλάξ.

Αντίθετα για τα αέρια καύσιμα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο, Υδρογόνο αλλά και για το Diesel(g) θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν ειδικοί πίνακες που λαμβάνουν υπόψη τη σύσταση και τη σύνθεση του καυσίμου αντί του Jet-A(g) dissociation αλλιώς θα παρατηρούνται πολύ μεγάλες αποκλίσεις κατά τη σχεδίαση της μηχανής. Επίσης

παρατηρούμε ότι για λειτουργία με τα καύσιμα αυτά αντί για Jet-A(g) θα πρέπει να γίνουν σημαντικές τροποποιήσεις κατά την επανασχεδίαση της μηχανής ώστε να ικανοποιούνται οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης π.χ. μείωση διατομής θερμού ακροφυσίου για τα αέρια καύσιμα και αύξηση για το Diesel, ρυθμίσεις στο σύστημα προσαγωγής καυσίμου λόγω μικρότερης κατανάλωσης και διαφορετικής σύστασης καυσίμου κλπ.

Εν κατακλείδι βγαίνει το συμπέρασμα ότι μια μηχανή που έχει σχεδιαστεί για λειτουργία με Jet-A καύσιμο μπορεί να δεχθεί απευθείας (από θερμοδυναμικής απόψεως) και χωρίς σημαντικές τροποποιήσεις τα καύσιμα JP-4 και JP-5 ενώ χρειάζονται ουσιώδεις μετατροπές σ' αυτή για ν' ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης με τα καύσιμα Φυσικό αέριο, Υδρογόνο και Μεθάνιο και λιγότερες με το Diesel.

4.5 Σύνοψη – Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό μελετήθηκε εκτενώς η διαδικασία με την οποία επεκτάθηκαν οι δυνατότητες του λογισμικού PROOSIS και αναλύθηκε η επίδραση του μοντέλου εργαζόμενου μέσου σε επίπεδο μηχανής. Αρχικά αναφέρθηκαν οι δύο βασικοί τρόποι με τους οποίους γίνεται η μοντελοποίηση του εργαζόμενου μέσου και τονίστηκαν τα πλεονεκτήματα χρησιμοποίησης πινάκων εργαζόμενου μέσου που παράγονται από λογισμικά χημικής ισορροπίας όπως το NASA CEA.

Στη συνέχεια παρουσιάστηκε το λογισμικό προσομοίωσης αεριοστρόβιλων PROOSIS το οποίο είναι ένα εργαλείο, με ευρεία εφαρμογή στην Ευρωπαϊκή έρευνα και βιομηχανία, που χρησιμοποιεί τους πίνακες αυτές για να κάνει υπολογισμούς του κύκλου της μηχανής. Έπειτα αναλύθηκε η διαδικασία με την οποία από το CEA και κάποιους υπολογιστικούς κώδικες σε Fortran έγινε εφικτή η παραγωγή αυτών των πινάκων για δύο μοντέλα καύσης και για τα καυσαέρια που προκύπτουν από την καύση διαφόρων καυσίμων πέραν του Jet-A. Το σχήμα 4.9 δίνει μια σφαιρική εικόνα για τον τρόπο με τον οποίο πραγματοποιήθηκε η παραπάνω διαδικασία.

Συνεχίζοντας έγινε μια παραμετρική μελέτη για να δούμε την επίδραση που έχει το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου και συγκεκριμένα παράμετροι όπως η χημική διάσταση και η σύνθεση του καυσίμου σε επίπεδο μηχανής. Η ανάλυση αυτή έγινε

για δύο κινητήρες: τον CFM56 ο οποίος είναι ένας πολύ κοινά χρησιμοποιούμενος κινητήρας στην πολιτική αεροπορία και τον GTAC που είναι ένας προηγμένος κινητήρας με ενδιάμεση ψύξη και επομένως εμφανίζει υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις.

Με το deck του CFM για τη σχεδιασμένη μηχανή έγινε αρχικά μελέτη για την επίδραση της διάστασης σε ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου (παροχή, πίεση και θερμοκρασία) σε διάφορες θέσεις της μηχανής όπου διαπιστώθηκε ότι οι διαφορές ανάμεσα στο μοντέλο καύσης που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων και σ' αυτό της πλήρους χημικής διάστασης στις 50atm, για το Jet-A(g), είναι σχεδόν αμελητέες. Ύστερα αναλύθηκε η επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου σε βασικές παραμέτρους της μηχανής (όπως T_{i4} , sfc κλπ.) καθώς και στα παραγόμενα καυσαέρια και συζητήθηκαν τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά του Υδρογόνου και των υπόλοιπων αερίων καυσίμων. Παράλληλα έγινε μια αναφορά στην επίδραση της χημικής διάστασης στην σύνθεση του ατμοσφαιρικού αέρα (ξηρού ή υγρού) και διαπιστώθηκε ότι παρόλο τις μικρές σχετικά θερμοκρασίες γίνεται αισθητή η παρουσία ορισμένων προϊόντων διάστασης και ειδικά οξειδίων του αζώτου.

Με τον κινητήρα GTAC αρχικά έγινε μια ανάλυση με το off-design deck για την επίδραση των μοντέλων χημικής διάστασης των διαφόρων καυσίμων (Jet-A, Diesel, Φυσικό αέριο κλπ.) στους παραμέτρους σχεδίασης της μηχανής, από την οποία διατυπώθηκε ότι κυρίως λόγω της απόκλισης της T_{i4} απαιτείται επανασχεδίαση της μηχανής σ' όλες τις περιπτώσεις για να ικανοποιήσουμε τις απαιτήσεις του αρχείου Engine_dp.dat στο σημείο σχεδίασης και έγινε μια εκτίμηση για τις αποκλίσεις που περιμένουμε κατά τη επανασχεδίαση στο design deck από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation. Το μοντέλο αυτό είναι που χρησιμοποιείται ευρέως για υπολογισμούς σχεδίασης στους αεριοστροβίλους. Στο design deck, όπου γίνεται η σχεδίαση της μηχανής με βάση τις παραμέτρους του αρχείου Engine_dp.dat, επαληθεύτηκαν οι υποθέσεις μας και βγήκαν κάποια χρήσιμα συμπεράσματα:

- Για την επίδραση της χημικής διάστασης η οποία μελετήθηκε με βάση τα μοντέλα Jet-A(g) no dissociation και Jet-A(g) dissociation. Διαπιστώθηκε ότι η επίδραση της χημικής διάστασης κατά τη σχεδίαση της μηχανής είναι ιδιαίτερα σημαντική και δεν θα πρέπει να αμελείται ειδικά όταν κάνουμε υπολογισμούς για το θερμό κομμάτι της, ειδάλλως εισάγονται σημαντικές αποκλίσεις.

- Για την επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου η οποία μελετήθηκε με βάση τα μοντέλα Jet-A(g) no dissociation και Jet-A(g), Diesel(g), JP-4, JP-5, Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο λαμβάνοντας υπόψη την πλήρη διάσταση. Διαπιστώθηκε ότι τα μοντέλα των υγρών καυσίμων Jet-A, Diesel, JP-4 και JP-5 dissociation παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά και μικρές σχετικά (αλλά όχι αμελητέες) αποκλίσεις από τη σχεδίαση που προκύπτει με το Jet-A(g) no dissociation, με το μοντέλο του Diesel να παρουσιάζει τα πιο κοντινά αποτελέσματα. Αντίθετα τα μοντέλα Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο dissociation παρουσιάζουν μεγάλες αποκλίσεις και η χρησιμοποίηση μοντέλων όπως το Jet-A(g) no dissociation αντί για ακριβείς πίνακες με τις ιδιότητες του καυσαερίου τους εισάγει τεράστια σφάλματα στη σχεδίαση της μηχανής.

Συνοπτικά η διαδικασία που ακολουθήθηκε για τα δύο deck του κινητήρα GTAC φαίνεται στο σχήμα 4.35.

Αφού αποδείχθηκε ότι είναι απαραίτητη η μοντελοποίηση του εργαζόμενου μέσου σύμφωνα με το μοντέλο της πλήρους διάστασης έγινε μια επιπλέον μελέτη με το design deck του GTAC για να εξετάσουμε την επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου στους υπολογισμούς σχεδίασης της μηχανής με βάση αναφοράς το μοντέλο Jet-A(g) dissociation αυτή τη φορά. Διαπιστώθηκε ότι από τις απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης, για τα καύσιμα JP-4, JP-5 και Jet-A(g) προκύπτει μηχανή με τα ίδια χαρακτηριστικά κάθε φορά. Επομένως η προκαταρκτική σχεδίαση μηχανής που θα χρησιμοποιεί καύσιμα τα JP-4 και JP-5 μπορεί να γίνει και με το μοντέλο του Jet-A(g) dissociation και εναλλάξ. Κάτι τέτοιο όμως δεν ισχύει για τα καύσιμα Diesel(g), Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο και ειδικοί πίνακες με τις ιδιότητες του καυσαερίου τους θα πρέπει να αναπαράγονται προκειμένου να ελαχιστοποιούνται οι αποκλίσεις και να γίνεται ακριβέστερη σχεδίαση της μηχανής.

Εν κατακλείδι βγήκε το συμπέρασμα ότι μια μηχανή που έχει σχεδιαστεί για λειτουργία με Jet-A καύσιμο μπορεί να δεχθεί απευθείας (από θερμοδυναμικής απόψεως) και χωρίς σημαντικές τροποποιήσεις τα καύσιμα JP-4 και JP-5 ενώ χρειάζονται ουσιώδεις μετατροπές σ' αυτή για ν' ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης με τα καύσιμα Φυσικό αέριο, Υδρογόνο και Μεθάνιο και λιγότερες με το Diesel.

5. Εναλλακτικά Καύσιμα στους Αεριοστρόβιλους

Στο κεφάλαιο αυτό αρχικά γίνεται μια περιεκτική εισαγωγή για τις προοπτικές χρήσεις των εναλλακτικών καυσίμων στην αεροπλοΐα αλλά και τα προβλήματα και οι τροποποιήσεις που απαιτούνται στις μηχανές για τη βραχυπρόθεσμη, μεσοπρόθεσμη και μακροπρόθεσμη εφαρμογή τους.

Στη συνέχεια μελετώνται δύο είδη βιοντήζελ, για τα οποία βρέθηκαν εκτενή στοιχεία στη βιβλιογραφία, ως προς τα χαρακτηριστικά της καύσης και ρύπανσης τους με το λογισμικό NASA CEA. Τέλος αφού παραχθούν για τα δύο αυτά εναλλακτικά καύσιμα οι πίνακες με τις ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου, σύμφωνα με τη διαδικασία που περιγράφηκε στην ενότητα 4.3, μελετάται η επίδραση που έχουν στην επανασχεδίαση της μηχανής GTAC με τα δύο deck που χρησιμοποιήθηκαν και στο προηγούμενο κεφάλαιο γι' αυτόν τον κινητήρα.

5.1 Προοπτικές χρήσης εναλλακτικών καυσίμων στους αεριοστρόβιλους

Σήμερα περίπου το 100% των αεροπορικών καυσίμων προέρχονται από το πετρέλαιο χρησιμοποιώντας τις γνωστές και συμβατικές τεχνολογίες διύλισης. Ωστόσο οι πρόσφατες διακυμάνσεις των τιμών και τα πεπερασμένα αποθέματα του αργού πετρελαίου έχουν εντείνει το ενδιαφέρον της αεροπορικής βιομηχανίας στις εναλλακτικές πηγές ενέργειας.

Το βασικό κίνητρο αυτού του ενδιαφέροντος είναι στην πραγματικότητα διττό: Πρώτον τα εναλλακτικά καύσιμα θα βοηθήσουν στο να σταθεροποιηθεί η διακύμανση των τιμών ανακουφίζοντας τη παγκόσμια ζήτηση για συμβατικά καύσιμα. Δεύτερον τα εναλλακτικά καύσιμα θα προσφέρουν περιβαλλοντολογικά οφέλη συμπεριλαμβάνοντας μια αξιόλογη μείωση του παραγόμενου CO₂ καθ' όλη τη διάρκεια ζωής του καυσίμου. Κατά συνέπεια το ιδανικό εναλλακτικό καύσιμο θα εκπληρώνει αμφότερες τις απαιτήσεις: θ' ανακουφίσει τη ζήτηση για καύσιμα που παράγονται από το αργό πετρέλαιο και θα μειώσει σημαντικά τις εκπομπές CO₂.

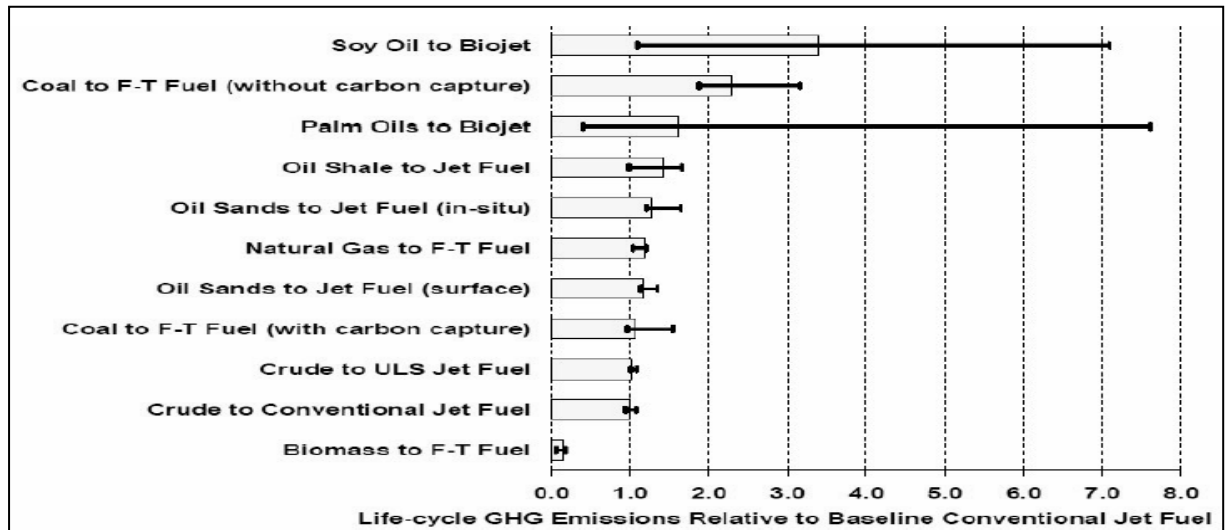
Προς το παρόν φαίνεται ότι ένα καύσιμο που θ' αποτελεί μείγμα κηροζίνης και συνθετικού καυσίμου (αποκαλείται και ως 'drop-in' καύσιμο) είναι αρκετό πιθανό να

εφαρμοσθεί στα υπάρχοντα και τωρινής κατασκευής αεροσκάφη. Το πλεονέκτημα των καυσίμων αυτών είναι ότι μπορούν κατευθείαν να αντικαταστήσουν τα συμβατικά καύσιμα που χρησιμοποιούνται στην αεροπλοΐα χωρίς να απαιτούνται σημαντικές μετατροπές στην μηχανή ή στο αεροσκάφος.

Συνθετικά καύσιμα αεροσκαφών μπορούν να παραχθούν χρησιμοποιώντας την διαδικασία Fischer Tropsch (FT) από άνθρακα (CTL, coal to liquid), φυσικό αέριο (GTL, gas to liquid) ή από άλλη πρώτη ύλη υδρογονανθράκων όπως η βιομάζα (BTL, biomass to liquid) ή ένας συνδυασμός άνθρακα και βιομάζας (CBTL, coal and biomass to liquid). Τα καύσιμα αυτά είναι πολύ παρεμφερή σε απόδοση με τα συμβατικά καύσιμα αλλά είναι καθαρότερα αφού περιέχουν σχεδόν μηδενικό θείο κάτι το οποίο συνεπάγεται παραγωγή λιγότερων εκπομπών από τη μηχανή. Επιπλέον τα FT καύσιμα επιδεικνύουν μεγαλύτερη θερμική ευστάθεια έχοντας σαν αποτέλεσμα λιγότερες δεξαμενές αποθήκευσης του καυσίμου, και εξαιρετικές ιδιότητες στις χαμηλές θερμοκρασίες διατηρώντας χαμηλό ιξώδες στις χαμηλότερες ατμοσφαιρικές θερμοκρασίες. Οι φτωχότερες ικανότητες λίπανσης, το χαμηλότερο ογκομετρικό θερμικό περιεχόμενο (θερμογόνος δύναμη) και η μείωση της στεγανότητας του συστήματος προσαγωγής του καυσίμου εξαιτίας της απουσίας αρωματικών, είναι μερικά από τ' αρνητικά χαρακτηριστικά των FT καυσίμων.

Οι εκπομπές του CO₂ που παράγονται από τον κύκλο ζωής των FT καυσίμων σχετίζονται με τον τύπο της πρώτης ύλης που χρησιμοποιείται για την παραγωγή τους. Οι διαδικασίες GTL και CTL θεωρούνται οι καλύτεροι υποψήφιοι για συνθετικά καύσιμα εξαιτίας της δυναμικής τους για ευρεία παραγωγή αλλά έχουν επιπλέον και υψηλότερες εκπομπές από τα συμβατικά καύσιμα [23], [24]. Οι επιπλέον εκπομπές CO₂ μπορούν να μειωθούν με τεχνικές παγίδευσης και απομόνωσης αλλά αυτό θα αυξήσει σημαντικά το κόστος του καυσίμου. Τα BTL συνθετικά καύσιμα έχουν χαμηλές εκπομπές CO₂ εξαιτίας της απορρόφησης του CO₂ για ανάπτυξη κατά τη φωτοσύνθεση αλλά έχουν χαμηλή προοπτική για ευρεία παραγωγή καυσίμων λόγω των μεγάλων ποσοτήτων βιομάζας που απαιτούνται για την παραγωγή τους.

Στο ακόλουθο σχήμα συγκρίνονται οι εκπομπές των αερίων του θερμοκηπίου για τα συνθετικά και συμβατικά καύσιμα.



Σχήμα 5.1: Εκπομπές αερίων του θερμοκηπίου για τα συνθετικά καύσιμα συγκριτικά με τα συμβατικά.

Τα Hydrotreated Renewable Jet επίσης συγκαταλέγονται ως ένας ακόμα τύπος εναλλακτικών καυσίμων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν άμεσα στις μηχανές σε συνδυασμό με το πετρέλαιο σε αναλογίες που φτάνουν το 50%. Ένα σημαντικό πλεονέκτημα της HRJ τεχνολογίας έναντι της CTL, GTL και BTL είναι το χαμηλότερο αρχικό κόστος. Ωστόσο το βασικό ζήτημα για τα HRJ καύσιμα είναι ο προσδιορισμός μιας φυτικής πηγής που να είναι εκμεταλλεύσιμη και να μπορεί να παραχθεί σ' ένα λογικό κόστος. Προς το παρόν εξετάζονται αρκετές επιλογές φυτικών πηγών συμπεριλαμβάνοντας τα καμελίνα, moringa, babacu, macauba, jatropa και την άλη.

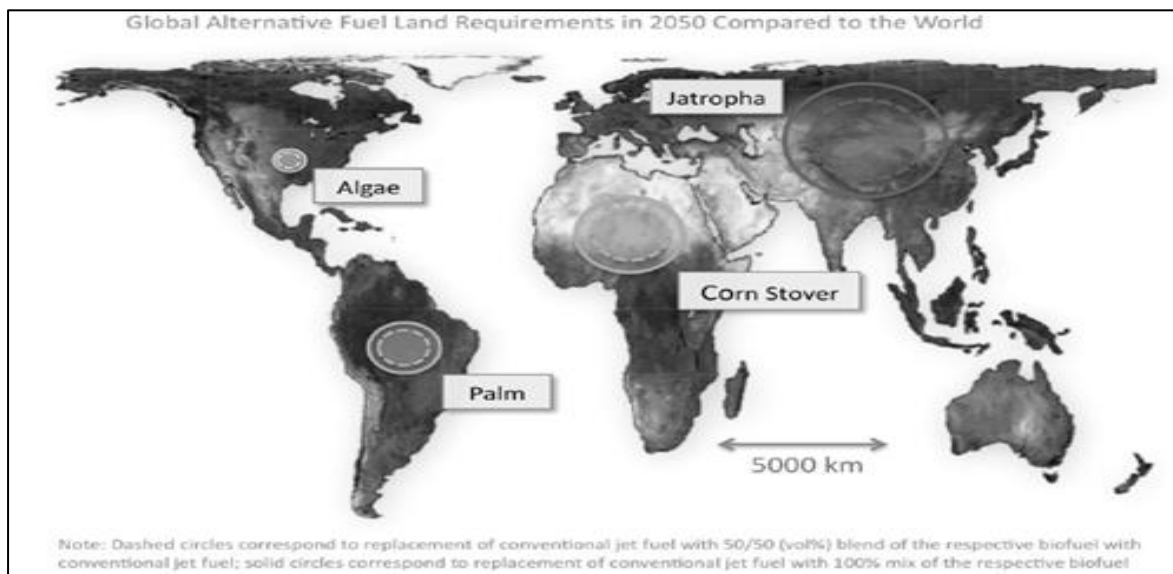
Η παραγωγή jatropa θεωρείται ότι είναι ώριμη και η τεχνολογία με την οποία θα μπορούσαν να παραχθούν τα HRJ καύσιμα σε μεγάλες ποσότητες θα είναι έτοιμη σε δύο με τέσσερα χρόνια. Ωστόσο η χαμηλή της παραγωγή ανά τετραγωνικό μέτρο σημαίνει ότι δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί από μόνη της για να ικανοποιήσει τις ανάγκες σε καύσιμα.

Σε μια πρόσφατη έρευνα που έγινε από την GIACC για ανάπτυξη στον κλάδο της αεροπλοΐας με μηδενικές εκπομπές άνθρακα, μέσω των εναλλακτικών καυσίμων, βρέθηκε ότι από την εξεταζόμενη πρώτη ύλη η πιο υποσχόμενη από άποψης έκτασης γης είναι η άλη. Συγκεκριμένα βρέθηκε ότι για να αντικαταστήσουμε τα συμβατικά αεροπορικά καύσιμα με 100% HRG καύσιμα από άλη απαιτείται μια περιοχή γης ελαφρώς μεγαλύτερη από τη Γαλλία ενώ στην περίπτωση των 100% HRJ καυσίμων

από jatropha πρέπει να αφιερωθεί μια περιοχή με την έκταση της Ρωσίας για την παραγωγή του συγκεκριμένου φυτού. Ωστόσο επισημαίνεται ότι η παραγωγή άλγης δεν είναι ακόμα ώριμη τεχνολογικά.

Στο σχήμα 5.2 φαίνονται οι ενδεικτικές απαιτήσεις σε εκτάσεις γης για διάφορα βιοκαύσιμα ώστε να καλύψουν τη χρήση των συμβατικών καυσίμων το 2050.

Ένα πιθανό χρονοδιάγραμμα σχετικά με την εφαρμογή των εναλλακτικών καυσίμων στην αεροπλοΐα παρουσιάστηκε από τον ICAO και δίνεται στο σχήμα 5.3.

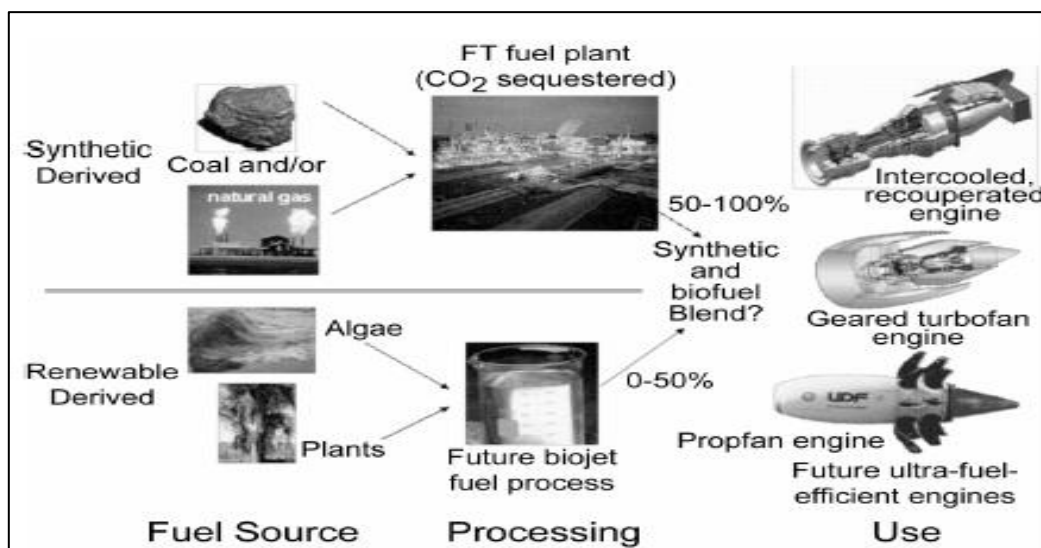


Σχήμα 5.2: Απαιτήσεις σε εκτάσεις γης για διάφορα βιοκαύσιμα ώστε να καλύψουν τη χρήση των συμβατικών καυσίμων το 2050.

Today	▶ 100 percent synthetic coal-to-liquid jet fuel certified
mid-2009	▶ 50 percent Fischer-Tropsch synthetic jet fuel blends from biomass, coal, and gas certification expected
2010	▶ 50 percent hydrotreated renewable synthetic jet fuel blends, such as algae, certification expected
	▶ 100 percent Fischer-Tropsch synthetic jet fuel certification expected
2013	▶ 100 percent synthetic gas-to-liquid jet fuel certification expected
	▶ 100 percent hydrotreated renewable synthetic jet fuel certification expected
.	
.	
.	

Σχήμα 5.3: Χρονοδιάγραμμα εφαρμογής εναλλακτικών καυσίμων.

Ενώ οι βραχυπρόθεσμες λύσεις για τα καύσιμα επικεντρώνονται κυρίως στην εφαρμογή των ‘drop-in’ καυσίμων, που είδαμε παραπάνω, τα οποία δεν απαιτούν σημαντικές μετατροπές στην μηχανή ή στο αεροσκάφος, οι μεσοπρόθεσμες λύσεις μπορεί να περιλαμβάνουν μείγματα εναλλακτικών καυσίμων μαζί με μεγάλες μεταβολές στη διαμόρφωση της μηχανής που θα βελτιώσουν τη θερμική απόδοση και επομένως την κατανάλωση καυσίμου. Παραδείγματα μελλοντικών διαμορφώσεων είναι οι μηχανές διπλού ρεύματος με μειωτήρα στροφών (with ducted or unducted propfans), αεριοστρόβιλοι με πολύ υψηλό λόγο παράκαμψης και μηχανές με βελτιωμένα χαρακτηριστικά του πυρήνα όπως πυρήνας με ενδιάμεση ψύξη και ανάκτηση ενέργειας, πυρήνας με ενδιάμεση ψύξη, πυρήνας ελέγχου της ροής και ενεργοί πυρήνες, οι οποίοι εξετάζονται στα πλαίσια της έρευνας NEWAC.



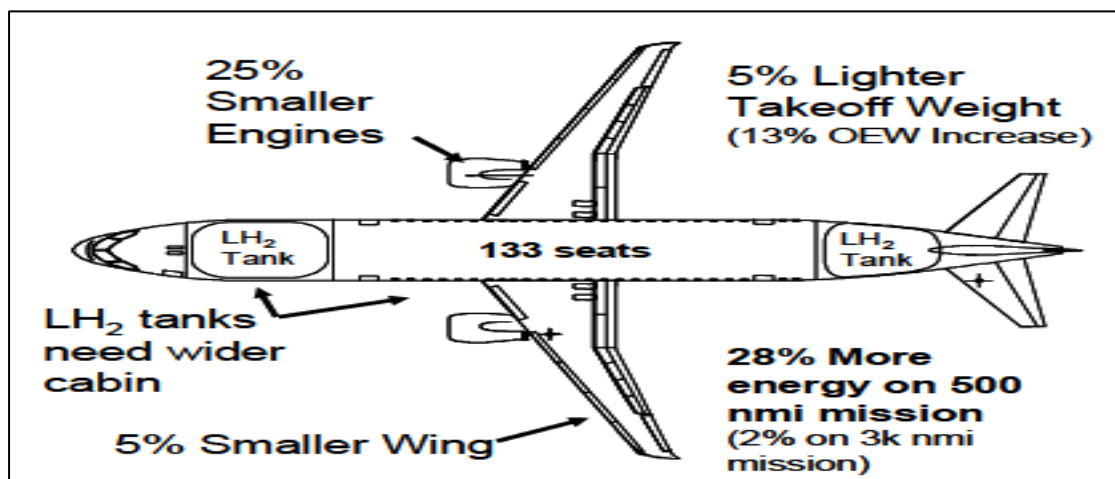
Σχήμα 5.4: Μεσοπρόθεσμες λύσεις για τα καύσιμα μπορεί να περιλαμβάνουν μείγματα εναλλακτικών καυσίμων μαζί με προηγμένη σχεδίαση της μηχανής.

Οι μακροπρόθεσμες λύσεις για τα καύσιμα μπορεί να περιλαμβάνουν καύσιμα με μηδενικό ή χαμηλό περιεχόμενο σε άνθρακα όπως το υγρό υδρογόνο ή το μεθάνιο. Το υδρογόνο μπορεί να παραχθεί από πυρηνική σύντηξη ή από την ηλιακή ενέργεια ενώ μεγάλες ποσότητες μεθανίου μπορούν να γίνουν διαθέσιμες από ένυδρα άλατα μεθανίου τα οποία είναι αποθηκευμένα στον πυθμένα των ωκεανών.

Και στις δύο περιπτώσεις απαιτούνται σημαντικές μετατροπές στο θάλαμο καύσης, στο σύστημα προσαγωγής του καυσίμου και στη σχεδίαση του αεροσκάφους. Ορισμένα τεστ με κρυογονικά καύσιμα απέδειξαν ότι θα χρειαστεί

ένας εναλλάκτης θερμότητας για θέρμανση και αεριοποίηση του καυσίμου πριν την καύση. Από την άλλη μεριά θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν μεγάλες δεξαμενές καυσίμου αντί για αποθήκευση του καυσίμου στα φτερά όπως γίνεται τώρα με την κηροζίνη ώστε να ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις μόνωσης και φόρτισης.

Στο σχήμα 5.5 παρουσιάζεται ένα αεροπλάνο Boeing 737 κατάλληλα διαμορφωμένο για να χρησιμοποιεί σα καύσιμο το υγρό υδρογόνο. Στη σχεδίαση αυτή οι εγκατεστημένες δεξαμενές καυσίμου θα αυξήσουν το βάρος του άδειου αεροσκάφους περίπου 13% σε σχέση με το αντίστοιχο βάρος ενός τυπικού αεροσκάφους. Ωστόσο επειδή το υγρό υδρογόνο είναι ένα καύσιμο χαμηλού βάρους, το βάρος κατά την απογείωση του αεροσκάφους θα είναι περίπου 5% λιγότερο. Αυτό σημαίνει ότι είναι εφικτό να μειώσουμε το μέγεθος των μηχανών των αεροσκαφών κατά 25% χρησιμοποιώντας μικρότερες και ελαφρύτερες μηχανές.



Σχήμα 5.5: Σχεδίαση του αεροπλάνου Boeing 737 για να χρησιμοποιεί σαν καύσιμο το υγρό υδρογόνο.

Εξαιτίας αυτών των μετατροπών το αεροσκάφος υπολογίζεται ότι θα χρησιμοποιεί 28% περισσότερη ενέργεια σε μια τυπική αποστολή 500 ναυτικών μιλίων ενώ για μια αποστολή 3000 ναυτικών μιλίων η επιπλέον ενέργεια μειώνεται κατά 2%. Σε αεροσκάφη μεγαλύτερου βεληγεκούς αναμένεται να επιτυγχάνεται εξοικονόμηση καυσίμου.

5.2 Βιοκαύσιμα και εφαρμογές με μοντέλα εργαζόμενου μέσου από βιοκαύσιμα

Η συνεχής παροχή εργαζόμενου μέσου στους αεριοστρόβιλους και η πλούσια σε οξειδωτικό καύση μετριάζει τους περιορισμούς που τίθενται στις ιδιότητες του καυσίμου όπως ο αριθμός οκτανίων και κετανίου (RON & CN) στις μηχανές εσωτερικής καύσης. Επίσης διάφορες πειραματικές μετρήσεις έδειξαν ότι είναι τεχνολογικά εφικτή η χρησιμοποίηση εναλλακτικών καυσίμων στους αεριοστρόβιλους όπως η αιθανόλη και το βιοντήζελ [25].

Στην ενότητα αυτή μελετήθηκαν δύο καύσιμα βιοντήζελ για τα οποία βρέθηκαν επαρκή στοιχεία στη βιβλιογραφία [25] και συγκρίθηκαν με τα συμβατικά καύσιμα Jet-A(g) και Diesel(g). Η ανάλυση αποτελείται από δύο σκέλη:

- Μελέτη καύσης και ρύπανσης των δύο βιοντήζελ με το NASA CEA.
- Μελέτη επίδρασης των δύο ειδών βιοντήζελ στην επανασχεδίαση της μηχανής με τα deck του GTAC μου μελετήθηκαν και στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Το βιοντήζελ λαμβάνεται από φυτικά έλαια (Vegetable Oils) ή από λίπος ζώων μέσω μιας διαδικασίας εστεροποίησης (trans-esterification). Στη διαδικασία αυτή το φυτικό έλαιο ή το λίπος του ζώου (τριγλυκερίδια) αντιδρούν με μια αλκοόλη υπό την παρουσία ενός καταλύτη όπως το νάτριο ή το υδροξείδιο του καλίου για να παραχθεί γλυκερόλη και βιοντήζελ. Μία από τις πιο κοινές μορφές βιοντήζελ παράγεται από σογιέλαιο (φυτικό έλαιο). Η διαδικασία εστεροποίησης βελτιώνει τις φυσικές ιδιότητες των καθαρών φυτικών ελαίων και συγκεκριμένα μειώνει το ιξώδες για να βελτιώσει την ατμοποίηση του καυσίμου στο θάλαμο καύσης.

Τα δύο βιοντήζελ (BD1 & BD2) που μελετήθηκαν έχουν την εξής σύσταση [25]:

Fatty Acid Methyl Esters	Formula	%Mass BD-1 (soybean oil)	%Mass BD-2 (chicken fat)	Enthalpy of Formation (kJ/kmol)
Linoleic Methyl ester	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	50,2	20,3	-513000
Oleic Methyl Ester	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	35,9	45,0	-643250
Palmitic Methyl Ester	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	10,4	19,3	-727500
Stearic Methyl Ester	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	3,5	8,6	-787400

Tetradecanoic Methyl Ester	$C_{15}H_{30}O_2$	0,0	0,2	-684300
9-Hexadecenoic Methyl Ester	$C_{17}H_{32}O_2$	0,0	6,6	-587000

Πίνακας 5.1: Κατά μάζα σύσταση των δύο βιοντήζελ.

Η κατώτερη θερμογόνος δύναμη για το Biodiesel1 είναι **38.002.300 J/kg** και για το Biodiesel2 **37.659.700 J/kg**, δεδομένα που χρειάζονται για τους υπολογισμούς που κάνουμε με τα deck του PROOSIS στη 2^η μελέτη.

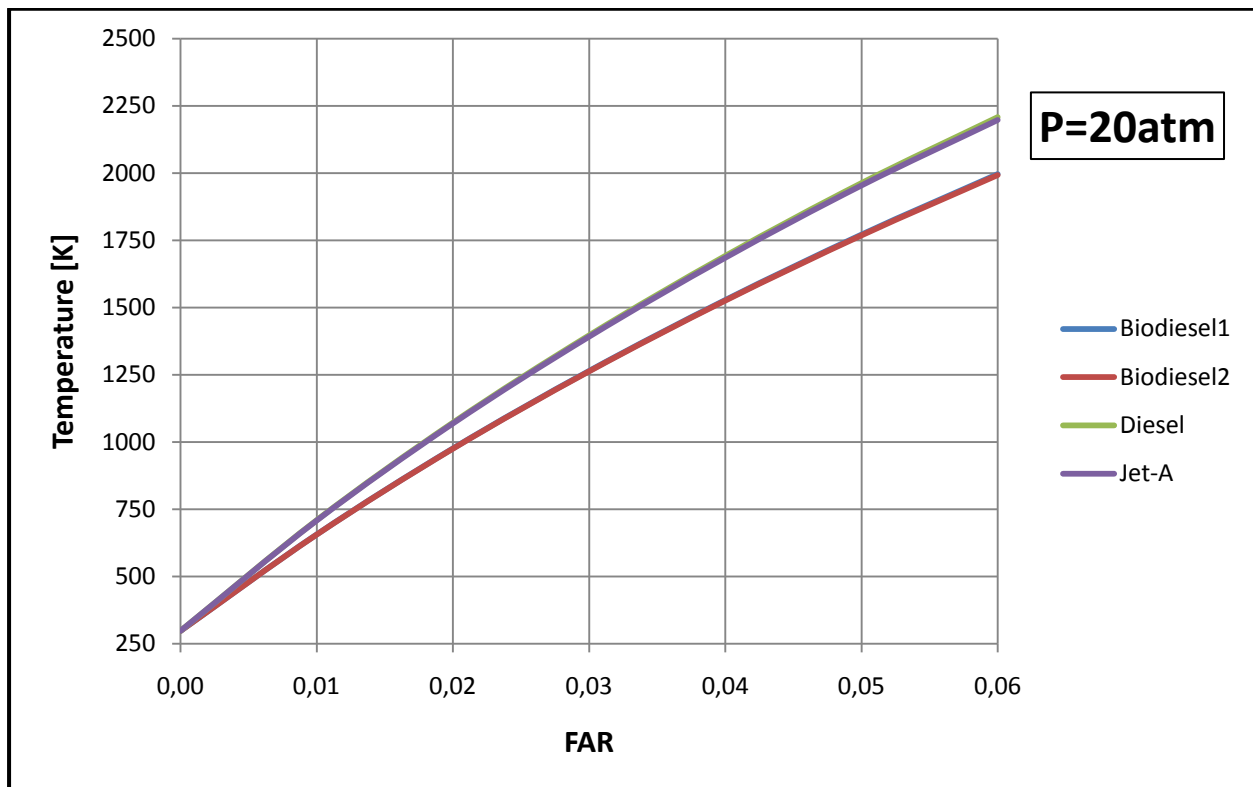
5.2.1 Μελέτη καύσης και ρύπανσης των δύο ειδών βιοντήζελ

Η μελέτη της καύσης στο NASA CEA (hr πρόβλημα) έγινε με βάση την παραπάνω σύσταση για τα δύο βιοντήζελ, για διάφορες πιέσεις στο θάλαμο καύσης $P=1,20$ και 50atm και για διάφορους λόγους καυσίμου-αέρα $FAR=0\div 0.06$ με βήμα 0.01. Οι παραπάνω εστέρες δεν βρίσκονται στη βιβλιοθήκη του CEA και θα πρέπει για τον καθένα από αυτούς να καθορίσουμε το όνομα, τον μοριακό τύπο και την ενθαλπία σχηματισμού του, όπως είδαμε στην ενότητα 3.3.2, καθώς και την κατά μάζα αναλογία του στο ολικό καύσιμο-βιοντήζελ.

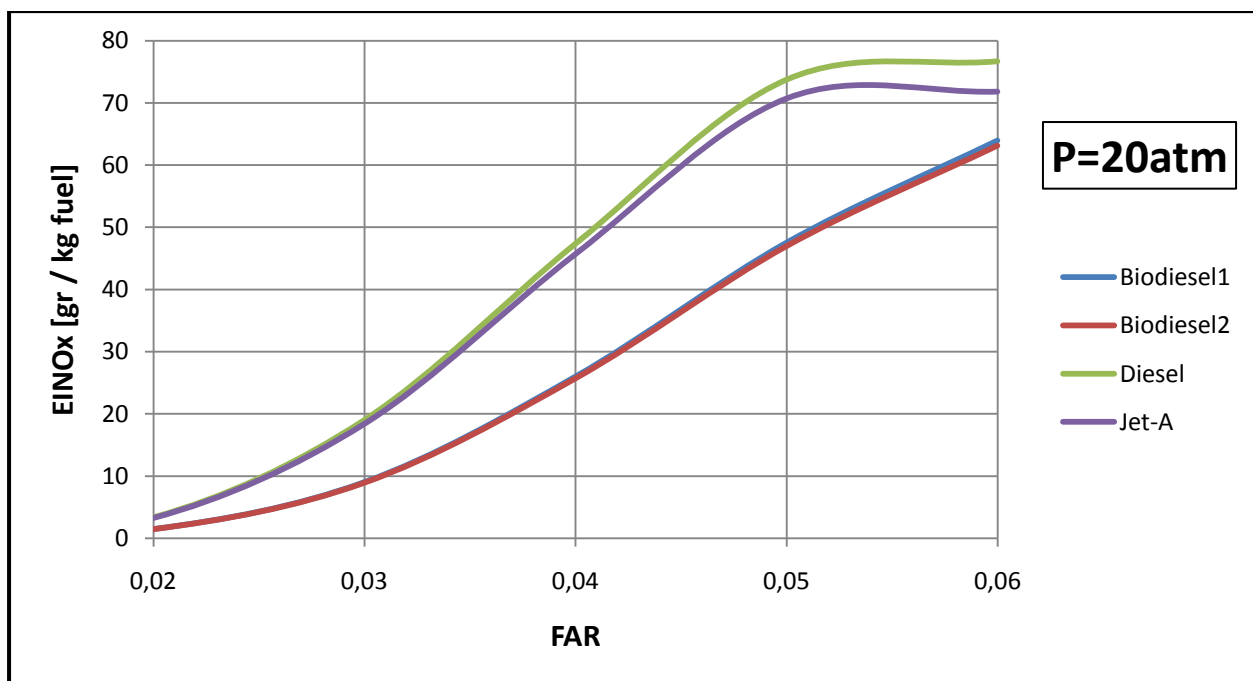
Ο υπολογισμός των ιδιοτήτων του καυσαερίου γίνεται με το μοντέλο της πλήρους διάστασης (dissociation model) δηλαδή δεν κάνουμε καμία ενέργεια στις καρτέλες omit και only του NASA CEA.

Τα γραφήματα για την θερμοκρασία της αδιαβατικής καύσης T καθώς και οι αναλογίες των NO_x & CO στο καυσαέριο, σε κάθε πίεση για τα δύο βιοκαύσιμα και για τα συμβατικά Jet-A(g) και Diesel(g), φαίνονται στα επόμενα σχήματα συναρτήσει του FAR.

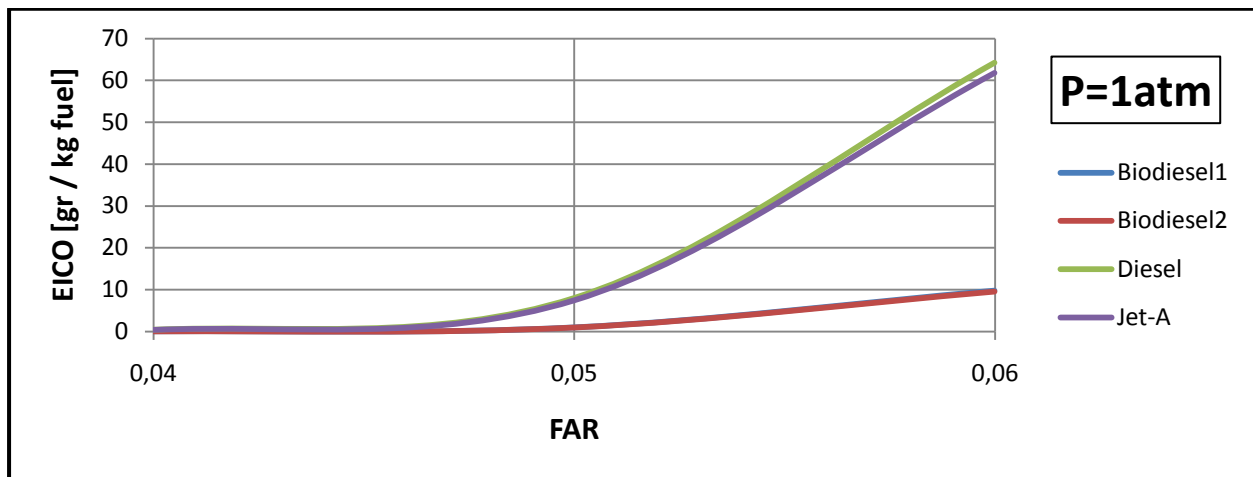
Επειδή η επίδραση της πίεσεως στη αδιαβατική θερμοκρασία της καύσης και στα παραγόμενα NO_x είναι σχεδόν ανεπαίσθητη παραθέτουμε ενδεικτικά μόνο τα διαγράμματα που αντιστοιχούν σε πίεση $P=20\text{atm}$. Για την περίπτωση του μονοξειδίου του άνθρακα παραθέτουμε τα διαγράμματα για όλες τις πιέσεις καθώς η επίδραση της πίεσης είναι πιο ισχυρή.



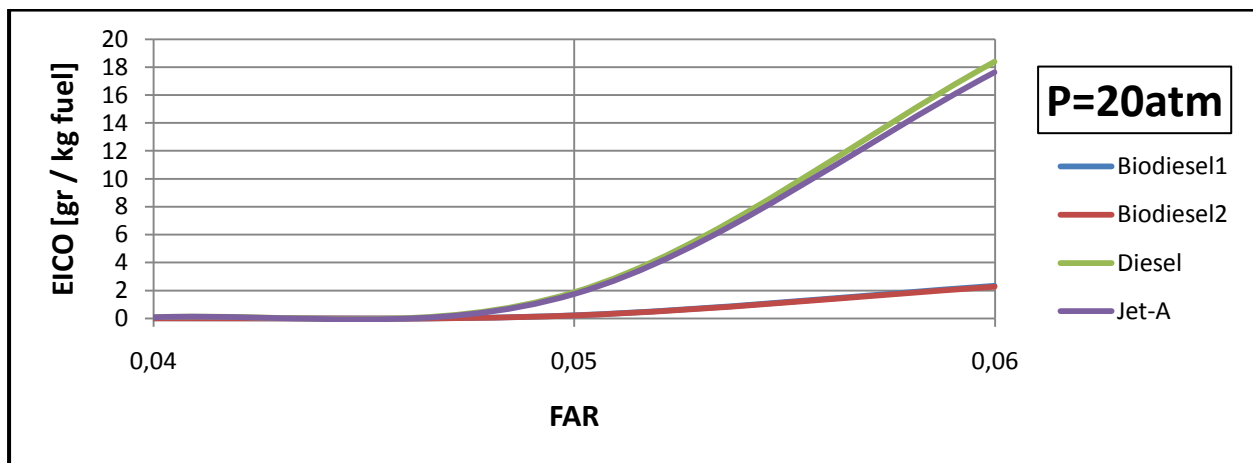
Σχήμα 5.6: Μεταβολή της θερμοκρασίας αδιαβατικής καύσης T συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=20\text{atm}$.



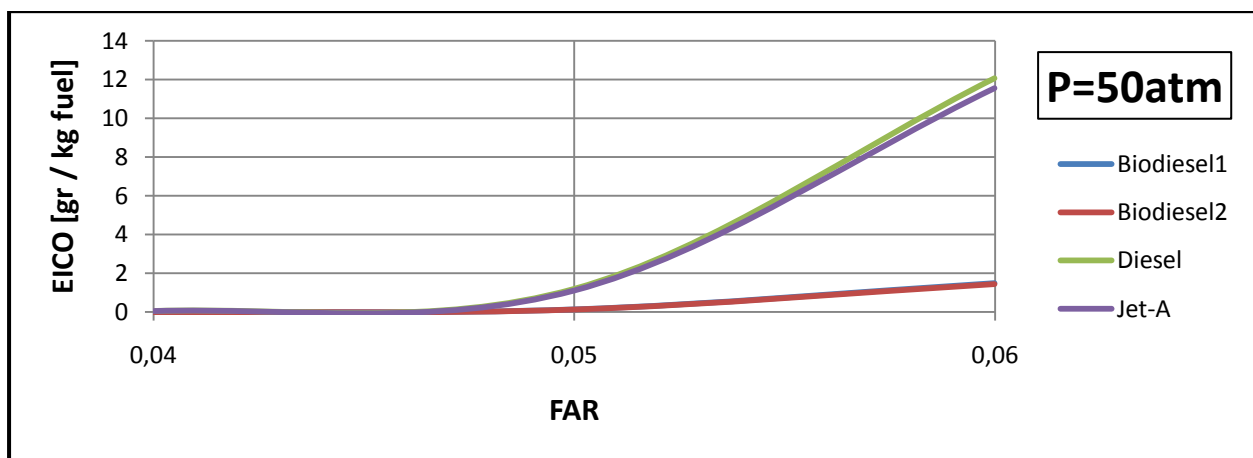
Σχήμα 5.7: Μεταβολή των παραγόμενων NO_x συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για $P=20\text{atm}$.



Σχήμα 5.8α: Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για P=1atm.



Σχήμα 5.8β: Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για P=20atm.



Σχήμα 5.8γ: Μεταβολή των παραγόμενων CO συναρτήσει του FAR για συμβατικά και εναλλακτικά καύσιμα με τη θεώρηση της χημικής διάστασης για P=50atm.

Το διάγραμμα για τα NO_x ξεκινάει από FAR=0.02 επειδή τότε αρχίζει να γίνεται αισθητή η επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου στο παραγόμενο καυσαέριο και για τα CO από FAR=0.04 επειδή πιο πριν τα παραγόμενα μονοξείδια του άνθρακα είναι μηδενικά.

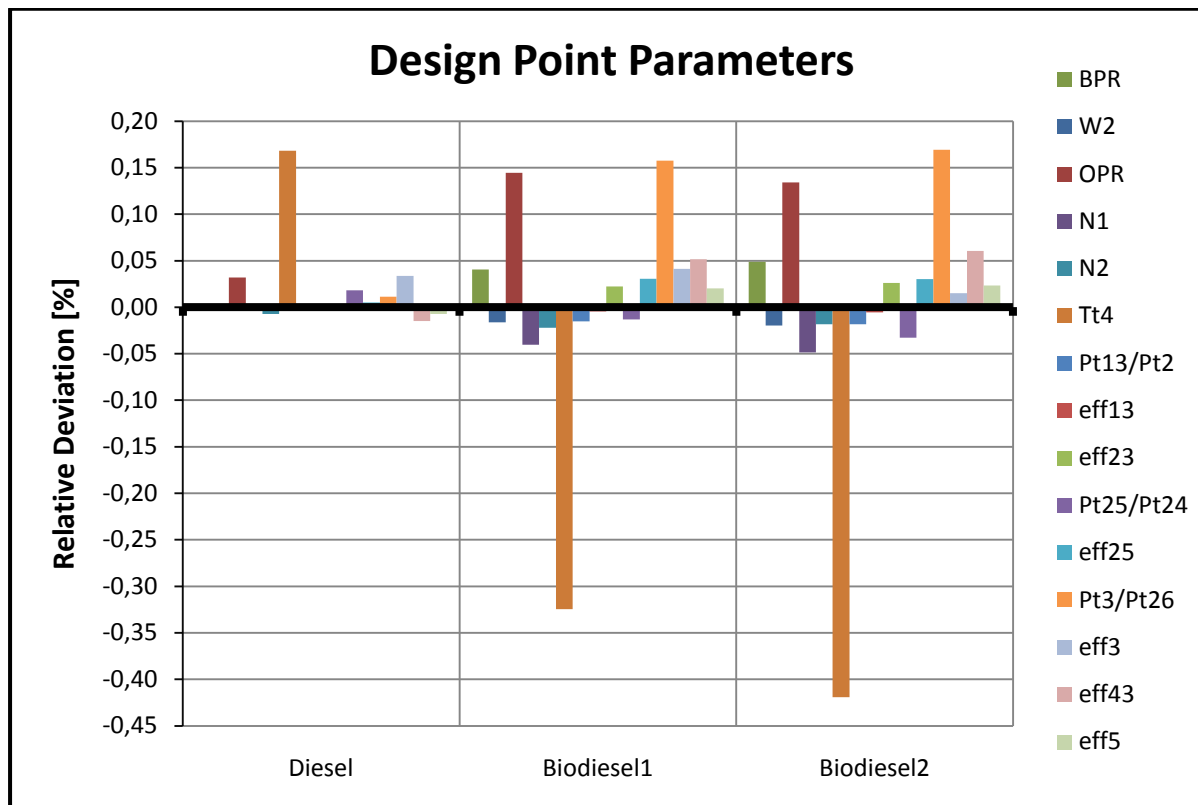
Από τη σύγκριση με τα συμβατικά καύσιμα, δηλαδή τα Jet-A(g) και Diesel(g), μπορούμε να συμπεράνουμε ότι τα δύο βιοκαύσιμα έχουν χαμηλότερη θερμοκρασία καύσης και εξαιτίας αυτού εκλύουν και λιγότερα οξείδια του αζώτου. Επίσης παράγουν και πολύ λιγότερο μονοξείδιο του άνθρακα το οποίο μειώνεται διαρκώς όσο αυξάνεται η πίεση (LeChatelier).

Επίσης παρατηρούμε ότι παρά τις διαφορές στη σύσταση των δύο βιοντήζελ, οι φυσικές ιδιότητες και οι ρύποι των καυσαερίων που παράγονται από τα καύσιμα αυτά είναι σχεδόν ταυτόσημα.

5.2.2 Μελέτη επίδρασης των δύο ειδών βιοντήζελ στην επανασχεδίαση μηχανής

Το πρώτο βήμα που έγινε ήταν να δημιουργηθούν τα xml αρχεία των δύο αυτών βιοκαυσίμων με το NASA CEA με την διαδικασία που περιγράφηκε στην ενότητα 4.3 και τη σύσταση του πίνακα 5.1.

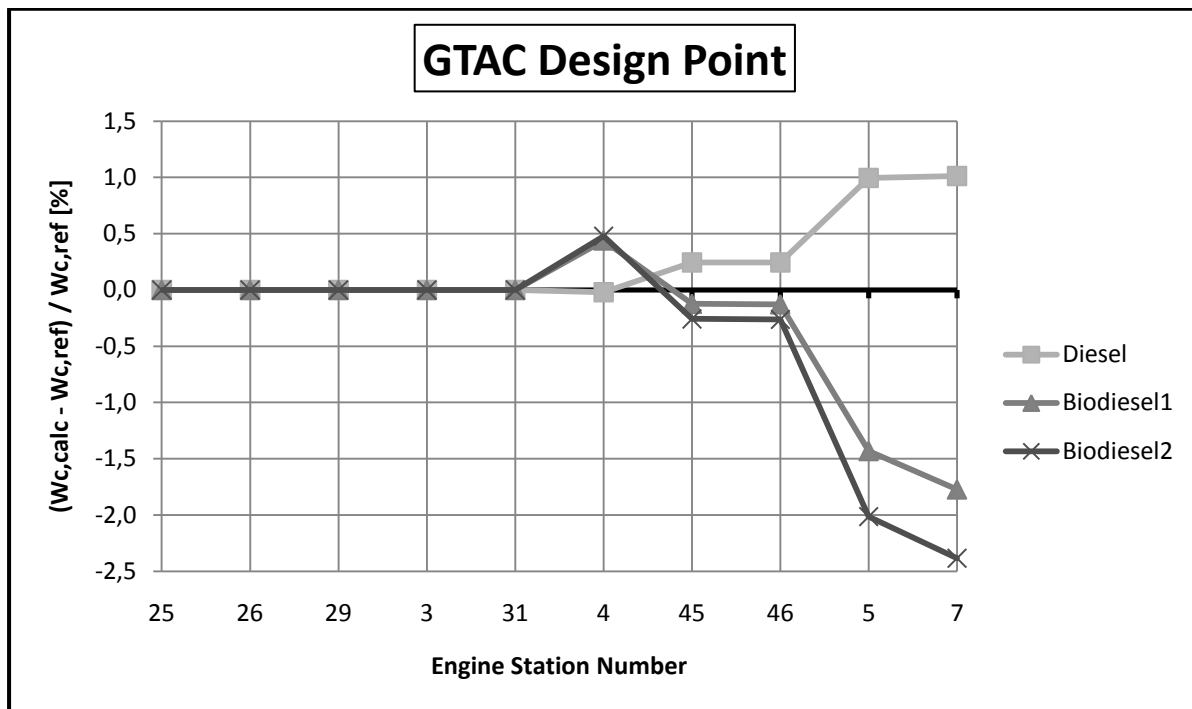
Τα αρχεία αυτά για το μοντέλο της χημικής διάστασης και για τα καύσιμα Biodiesel1, Biodiesel2, Jet-A(g) & Diesel(g) τροφοδότησαν το off-design deck του κινητήρα GTAC για να δούμε εάν κρίνεται απαραίτητη η επανασχεδίαση της μηχανής που έχει σχεδιαστεί κατ' αρχάς με το μοντέλο Jet-A(g) dissociation. Έτσι στη συνέχεια έγινε ο υπολογισμός των παραμέτρων σχεδίασης της μηχανής (αρχείο Engine_dp.dat) για κάθε μοντέλο και προσδιοριστήκαν οι αποκλίσεις τους από τις τιμές αναφοράς που έχουν προκύψει με το μοντέλο Jet-A(g) dissociation. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο σχήμα 5.11.



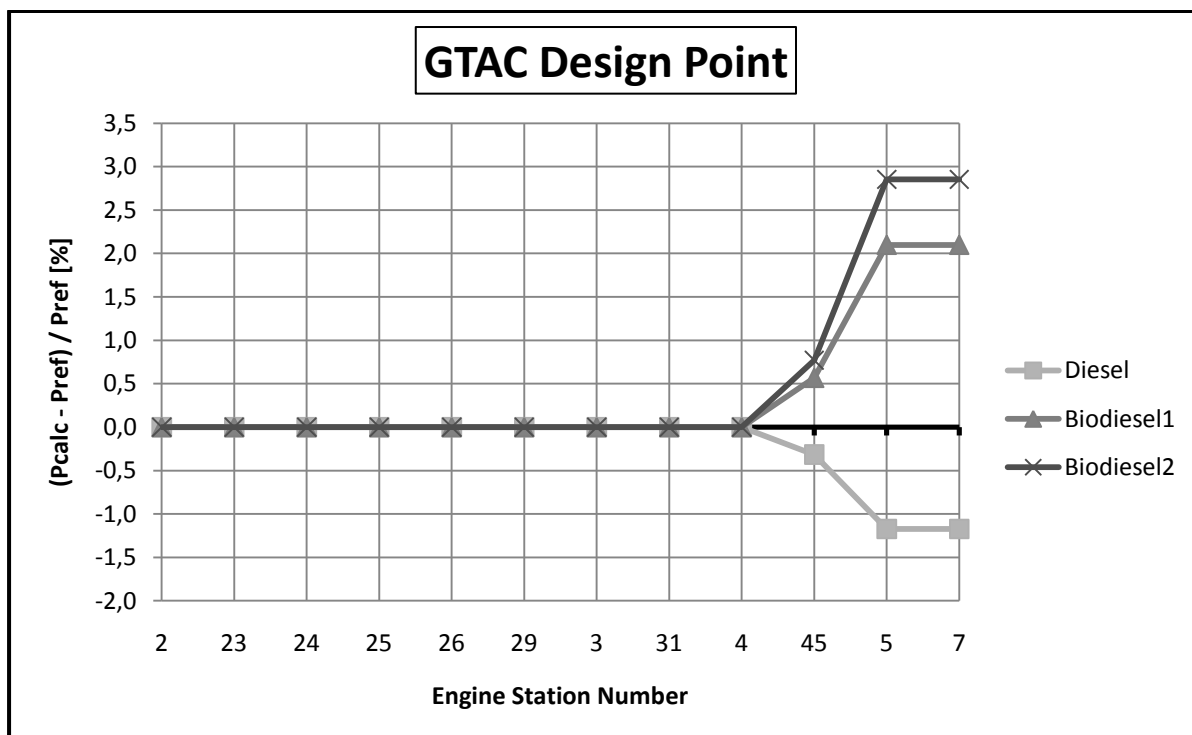
Σχήμα 5.9: Ποσοστιαία απόκλιση των παραμέτρων του αρχείου Engine_dp από τις τιμές του Jet-A(g) dissociation για τα μοντέλα Diesel(g), BioDiesel1 & BioDiesel2 dissociation.

Από το παραπάνω γράφημα και τις παρατηρήσεις που έγιναν στο τέταρτο κεφάλαιο σχετικά με την επίδραση της θερμοκρασίας T_{t4} συμπεραίνουμε ότι απαιτείται επανασχεδίαση της μηχανής και ότι τις μεγαλύτερες διαφορές σε σχέση με τη σχεδίαση που προκύπτει από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation τις περιμένουμε με τη σειρά από τα μοντέλα: BioDiesel2, BioDiesel1, Diesel(g).

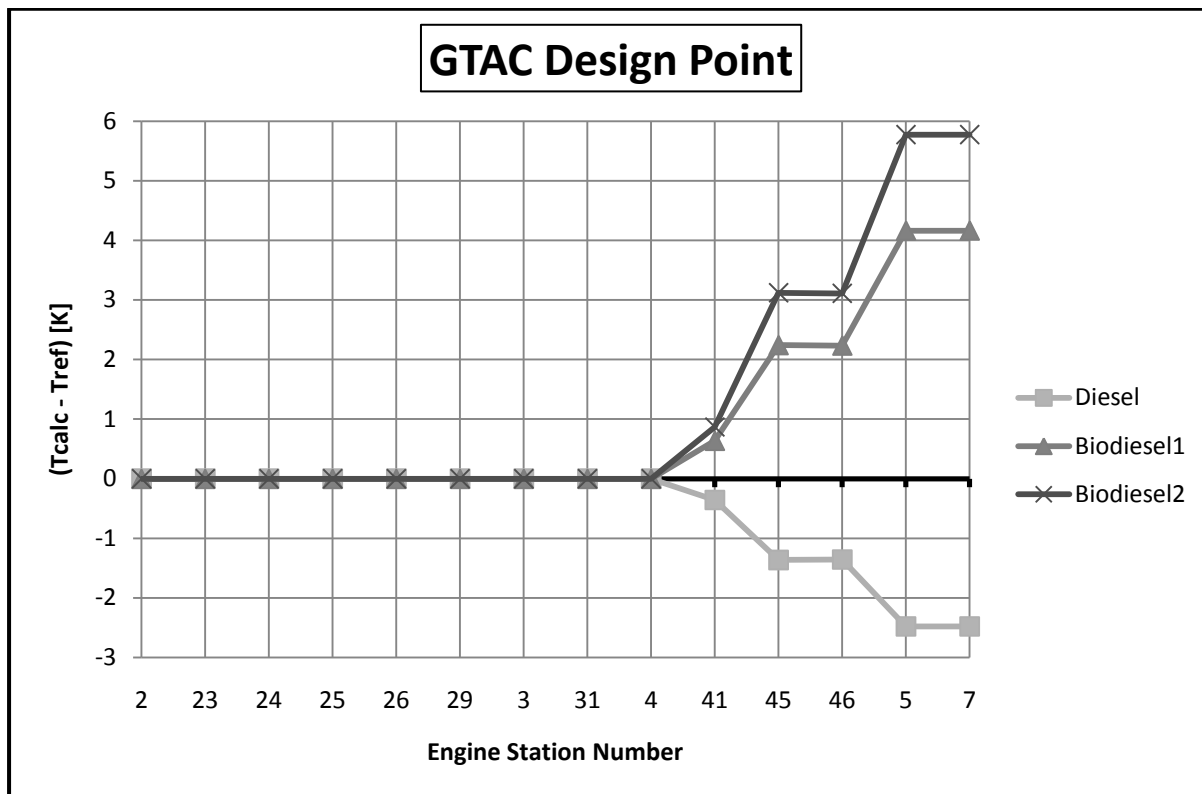
Στη συνέχεια τρέχοντας το design deck του κινητήρα GTAC επιβεβαιώνεται το παραπάνω συμπέρασμα για τις αποκλίσεις κατά την επανασχεδίαση. Ακολούθως φαίνονται κάποια ενδεικτικά σχήματα από την επανασχεδίαση της μηχανής με τις αποκλίσεις κάθε μοντέλου εργαζόμενου μέσου από το Jet-A(g) dissociation.



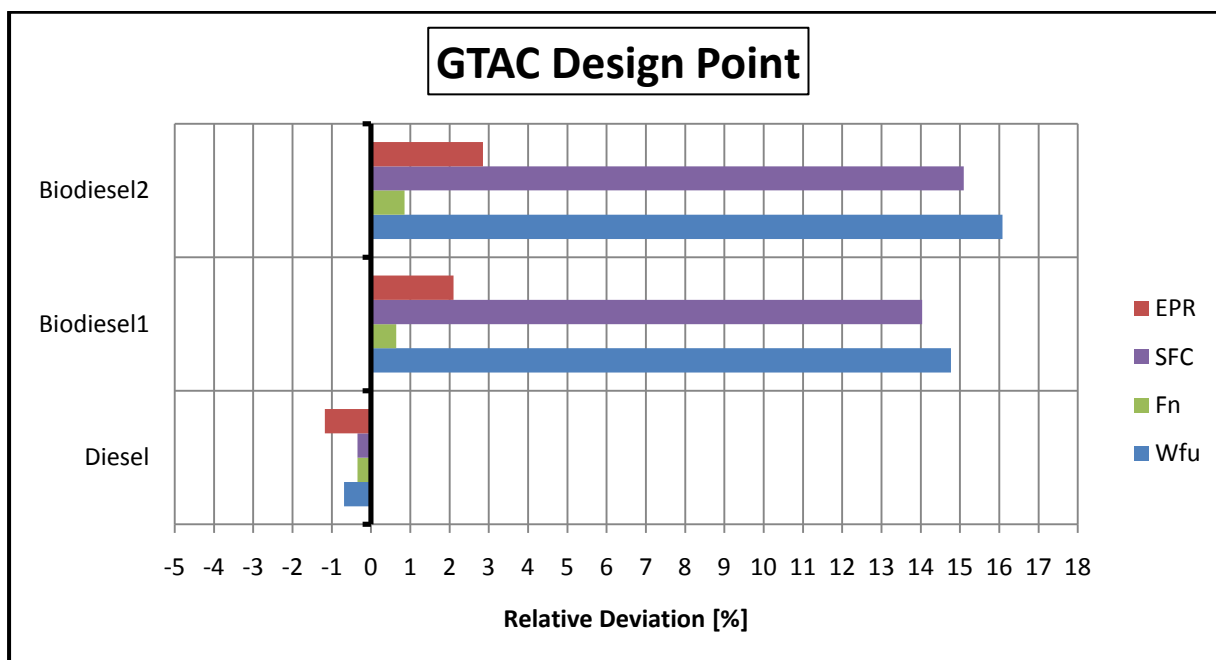
Σχήμα 5.10: Ποσοστιαία απόκλιση της ανοιγμένης παροχής μάζας του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



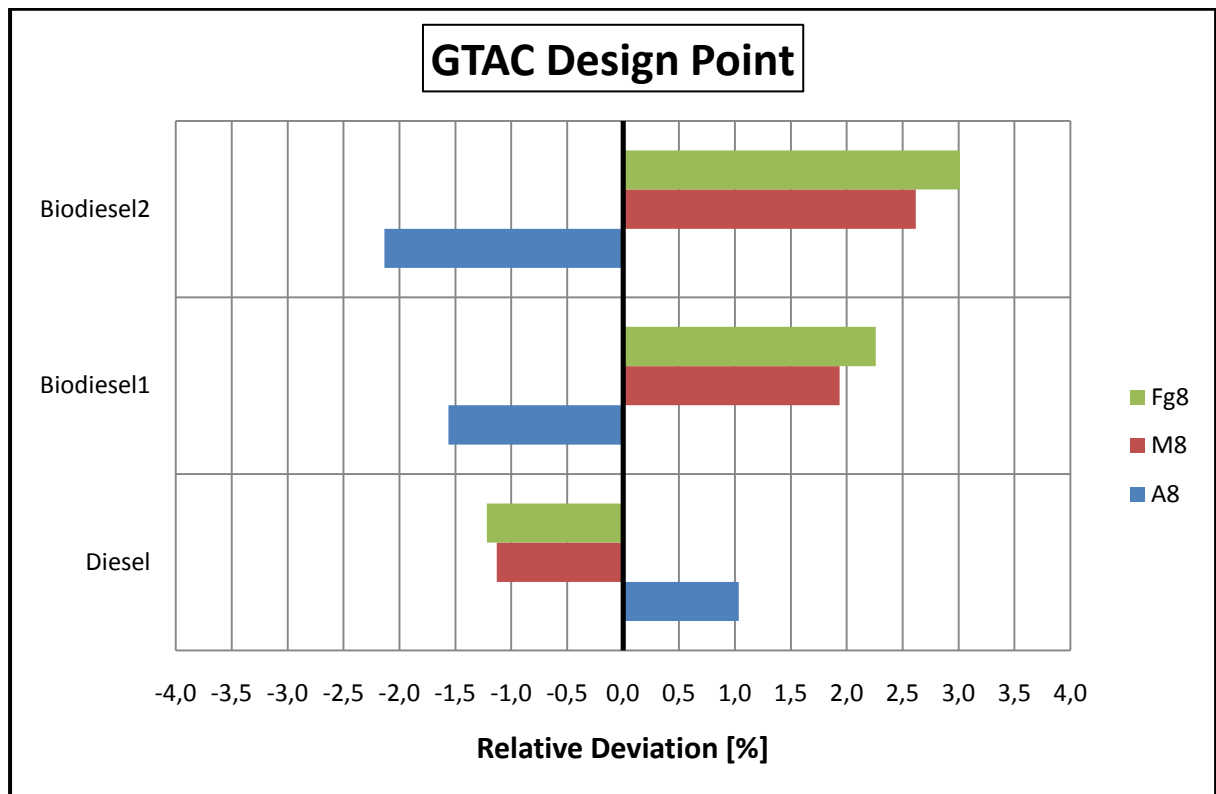
Σχήμα 5.11: Ποσοστιαία απόκλιση της ολικής πίεσης του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 5.12: Απόλυτη απόκλιση της ολικής θερμοκρασίας του εργαζόμενου μέσου με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 5.13: Ποσοστιαία απόκλιση βασικών παραμέτρων επίδοσεων της μηχανής με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.



Σχήμα 5.14: Ποσοστιαία απόκλιση παραμέτρων του θερμού ακροφυσίου της μηχανής με τα μοντέλα Diesel(g), Biodiesel1 και Biodiesel2 dissociation από το μοντέλο Jet-A(g) dissociation για τον κινητήρα GTAC στο σημείο σχεδίασης.

Από τα παραπάνω σχήματα παρατηρούμε ότι οι αποκλίσεις για το πρώτο βιοντήζελ από τη σχεδίαση που προκύπτει με το συμβατικό Jet-A(g) φτάνουν:

- το 1.8%, 2.1% και 4K για την ανοιγμένη παροχής μάζας, ολική πίεση και θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου αντίστοιχα
- το 14.8%, 0.6%, 14% και 2.1% για την κατανάλωση καυσίμου, καθαρή ώση, ειδική κατανάλωση καυσίμου και τον ολικό λόγο πίεσης της μηχανής
- το 1.6%, 2% και 2.3% για τη διατομή, αριθμό Mach και μικτή ώση του θερμού ακροφυσίου

Οι ίδιες αποκλίσεις για το δεύτερο βιοντήζελ φτάνουν:

- το 2.4%, 2.9% και 6K για την ανοιγμένη παροχής μάζας, ολική πίεση και θερμοκρασία του εργαζόμενου μέσου αντίστοιχα

- το 16%, 0.9%, 15.1% και 2.9% για την κατανάλωση καυσίμου, καθαρή ώση, ειδική κατανάλωση καυσίμου και ολικό λόγος πίεσης της μηχανής
- το 2.1%, 2.6% και 3% για τη διατομή, αριθμό Mach και μικτή ώση του θερμού ακροφυσίου

Οι παραπάνω αποκλίσεις είναι σημαντικές και θα πρέπει όταν γίνεται σχεδίαση της μηχανής που θα λειτουργεί με τα δύο αυτά βιοκαύσιμα να δημιουργούνται ειδικοί πίνακες εργαζόμενου μέσου που λαμβάνουν υπόψη τη σύστασή τους αντί για το μοντέλο Jet-A(g) dissociation. Επιπλέον παρατηρούμε ότι χρειάζονται κάποιες μετατροπές στην μηχανή για λειτουργία με τα δύο βιοκαύσιμα αντί για Jet-A ώστε να ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης π.χ. μείωση της διατομής του θερμού ακροφυσίου, ρυθμίσεις στο σύστημα προσαγωγής του καυσίμου λόγω της αυξημένης κατανάλωσης, υλικά με μεγαλύτερη ανθεκτικότητα στις θερμικές καταπονήσεις λόγω των υψηλότερων πιέσεων (EPR) κλπ.

Τα αποτελέσματα σχεδίασης με το Diesel προσεγγίζουν σε μεγαλύτερο βαθμό τη σχεδίαση που προκύπτει με το Jet-A. Πιθανόν η χρήση ενός μείγματος συμβατικού καυσίμου π.χ. Jet-A ή Diesel με το 1^ο βιοντήζελ, τα αποκαλούμενα drop-in καύσιμα που είδαμε και στην προηγούμενη ενότητα, να δίνει τις προοπτικές για άμεση εφαρμογή στις υπάρχουσες μηχανές χωρίς σημαντικές μετατροπές.

5.3 Σύνοψη – Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό έγινε μια πρώτη νύξη για τις προοπτικές χρήσεις των εναλλακτικών καυσίμων στους αεριοστρόβιλους σε βραχυπρόθεσμο, μεσοπρόθεσμο και μακροπρόθεσμο χρονικό ορίζοντα. Τονίστηκαν τα πλεονεκτήματα αλλά και διάφορες δυσκολίες που έγκειται στην εφαρμογή τους.

Στη συνέχεια ακολούθησαν δύο μελέτες για δύο βιοντήζελ τα χαρακτηριστικά των οποίων ανακτήθηκαν από τη βιβλιογραφία. Η πρώτη είχε να κάνει με την μελέτη του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση τους στο CEA. Συγκρίθηκαν με τα συμβατικά καύσιμα Jet-A και Diesel και αποδείχτηκε ότι λόγω της χαμηλότερης θερμοκρασίας καύσης τους παράγουν και πολύ λιγότερα NOx. Επίσης διαπιστώθηκε ότι εκλύουν και λιγότερο CO και ότι παρόλο που έχουν διαφορετική σύσταση τα δύο βιοντήζελ, οι ιδιότητες του καυσαερίου τους είναι σχεδόν ίδιες.

Τέλος έγινε μια δεύτερη μελέτη για την επίδραση που έχουν τα δύο αυτά βιοκαύσιμα στην επανασχεδίαση της μηχανής GTAC. Διαπιστώθηκε ότι όταν κάνουμε επανασχεδίαση της μηχανής με βάση τα δύο βιοντήζελ θα πρέπει να αναπαράγονται ειδικοί πίνακες (όπως και με τα καύσιμα Diesel, Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο) που λαμβάνουν υπόψη τη σύσταση τους, αντί για το μοντέλο Jet-A(g) dissociation, ειδάλως θα προκύψουν σημαντικές αποκλίσεις από την πραγματικότητα. Οι αποκλίσεις στην επανασχεδίαση της μηχανής εξετάσαμε ότι είναι μικρότερες για το πρώτο βιοντήζελ από το δεύτερο. Ωστόσο είδαμε ότι και στις δύο περιπτώσεις είναι αρκετά σημαντικές ώστε ν' απαιτούνται μετατροπές στην μηχανή για να χρησιμοποιηθούν άμεσα σ' αυτή σαν καύσιμα αντί για Jet-A και συγχρόνως να ικανοποιούνται οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης.

Το βασικό συμπέρασμα του κεφαλαίου είναι ότι μείγμα συμβατικού καυσίμου όπως κηροζίνη ή diesel μαζί με κάποιο συνθετικό καύσιμο όπως το 1^ο βιοντήζελ (drop-in fuel) έχει τη δυναμική για άμεση εφαρμογή στους υπάρχοντες κινητήρες χωρίς να χρειάζονται σημαντικές μετατροπές.

6. Σύνοψη – Συμπεράσματα

Κύριος στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η αντικατάσταση του παλαιότερου μοντέλου της καύσης που υπέθετε πλήρη καύση και αγνόηση της χημικής διάστασης (no dissociation model) και η χρησιμοποίηση μιας πιο προηγμένης μεθόδου όπως είναι το μοντέλο της χημικής ισορροπίας με διάσταση των προϊόντων της καύσης (dissociation model), η οποία προσφέρει και περισσότερες δυνατότητες για μελέτη της επίδρασης διαφόρων συμβατικών και εναλλακτικών καυσίμων. Στο πλαίσιο αυτό εξετάστηκαν τα εξής θέματα:

Το πρώτο θέμα που συζητήθηκε ήταν οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση της καύσης στον υπολογιστή καθώς και τα διάφορα λογισμικά που κάνουν μοντελοποίηση της καύσης και προσομοίωση ολόκληρης της λειτουργίας της μηχανής. Από το απλό μοντέλο της πλήρους καύσης που αγνοεί την επίδραση της χημικής διάστασης, αναλύθηκε το πιο ακριβές μοντέλο της χημικής ισορροπίας με διάσταση των προϊόντων της καύσης και παρουσιάστηκε ένα τυπικό παράδειγμα για πληρέστερη κατανόηση του προβλήματος ενώ έγινε και μια αναφορά στις αρχές που διέπουν τη χημική κινητική. Στη συνέχεια παρουσιάστηκαν διάφορα λογισμικά, ελεύθερα ή εμπορικά, τα οποία κάνουν μοντελοποίηση της καύσης στον υπολογιστή είτε με τη μέθοδο της χημικής ισορροπίας είτε με αυτή της χημικής κινητικής. Τέλος έγινε αναφορά σε κάποια πολύ κοινά λογισμικά προσομοίωσης της λειτουργίας των αεριοστροβίλων που χρησιμοποιούνται ευρέως στην έρευνα και στη βιομηχανία.

Στη συνέχεια αναλύθηκε εκτενώς το λογισμικό χημικής ισορροπίας Chemical Equilibrium with Applications της NASA. Αρχικά παρουσιάστηκαν οι δυνατότητες και τα χαρακτηριστικά που το κάνουν να είναι ένα από τα πιο κοινά χρησιμοποιούμενα λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης στους αεριοστροβίλους. Αφού περιγράφηκε η βασική του δομή έγινε μια βήμα προς βήμα ανάλυση για το πώς δημιουργούμε το αρχείο εισόδου και το πώς χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα είτε σε περίπτωση που όλα τα αντιδρώντα βρίσκονται στη θερμοδυναμική του βιβλιοθήκη είτε σε περίπτωση που κάποιο από αυτά καθορίζεται από το χρήστη. Η ανάλυση αυτή για την 1^η περίπτωση συνοδεύτηκε από την επίλυση μιας πρακτικής εφαρμογής για

μεγαλύτερη κατανόηση ενώ παρουσιάστηκαν δύο κώδικες σε Fortran που είναι ιδιαίτερα χρήσιμοι στη περίπτωση που έχουμε επίλυση προβλήματος με «άγνωστα» για το CEA αντιδρώντα. Έπειτα έγινε μια ανάλυση για την επίδραση που έχει η χημική διάσταση στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καυσαερίου του Jet-A καθώς και οι διαφορές που εισάγονται από την αγνόησή της. Παρατηρήθηκαν σημαντικές αποκλίσεις σε χαρακτηριστικά μεγέθη όπως στο γ , Cp, R και στη θερμοκρασία της καύσης και τονίστηκε η ανάγκη για χρησιμοποίηση του μοντέλου της χημικής ισορροπίας με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης για ακριβέστερους υπολογισμούς ειδικά στο θερμό κομμάτι της μηχανής όπου παρατηρούνται και υψηλότερες θερμοκρασίες. Τέλος έγινε μια σύντομη ανάλυση για την επίδραση των κυριότερων λογισμικών χημικής ισορροπίας στις ιδιότητες του καυσαερίου που παράγεται από την καύση του μεθανίου και συζητήθηκε η ανακρίβεια που εισάγουν στους υπολογισμούς.

Το επόμενο θέμα που αναλύθηκε εκτενώς ήταν η επέκταση των δυνατοτήτων του λογισμικού PROOSIS και η μελέτη της επίδρασης του μοντέλου εργαζόμενου μέσου σε επίπεδο μηχανής. Αρχικά αναφέρθηκαν οι δύο βασικοί τρόποι με τους οποίους γίνεται η μοντελοποίηση του εργαζόμενου μέσου και τονίστηκαν τα πλεονεκτήματα χρησιμοποίησης πινάκων εργαζόμενου μέσου που παράγονται από λογισμικά χημικής ισορροπίας όπως το NASA CEA. Στη συνέχεια παρουσιάστηκε το λογισμικό προσομοίωσης αεριοστρόβιλων PROOSIS το οποίο είναι ένα εργαλείο, με ευρεία εφαρμογή στην Ευρωπαϊκή έρευνα και βιομηχανία, που χρησιμοποιεί τους πίνακες αυτές για να κάνει υπολογισμούς του κύκλου της μηχανής. Το PROOSIS ωστόσο περιλαμβάνει μονάχα πίνακες με τις ιδιότητες του καυσαερίου που έχει προκύψει από την καύση του Jet-A και έτσι αναλύθηκε η διαδικασία με την οποία από το CEA και κάποιους υπολογιστικούς κώδικες σε Fortran έγινε εφικτή η παραγωγή αυτών των πινάκων για δύο μοντέλα καύσης και για τα καυσαέρια που προκύπτουν από την καύση διαφόρων καυσίμων πέραν του Jet-A. Το σχήμα 4.9 δίνει μια σφαιρική εικόνα για τον τρόπο με τον οποίο πραγματοποιήθηκε η διαδικασία αυτή.

Συνεχίζοντας έγινε μια παραμετρική μελέτη για να δούμε την επίδραση που έχει το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου και συγκεκριμένα παράμετροι όπως η χημική

διάσταση και η σύνθεση του καυσίμου σε επίπεδο μηχανής. Η ανάλυση αυτή έγινε για δύο κινητήρες σε τρία deck του PROOSIS: τον CFM56 ο οποίος είναι ένας πολύ κοινά χρησιμοποιούμενος κινητήρας στην πολιτική αεροπορία και τον GTAC που είναι ένας προηγμένος κινητήρας με ενδιάμεση ψύξη και επομένως εμφανίζει υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις.

Με το deck του CFM για τη σχεδιασμένη μηχανή έγινε αρχικά μελέτη για την επίδραση της διάστασης σε ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου (παροχή, πίεση και θερμοκρασία) σε διάφορες θέσεις της μηχανής όπου διαπιστώθηκε ότι οι διαφορές ανάμεσα στο μοντέλο καύσης που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων (no dissociation model) και σ' αυτό της πλήρους χημικής διάστασης (dissociation model) στις 50atm, για το Jet-A(g), είναι σχεδόν αμελητέες. Ύστερα αναλύθηκε η επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου σε βασικές παραμέτρους της μηχανής (όπως T_{14} , SFC κλπ.) καθώς και στα παραγόμενα καυσαέρια και συζητήθηκαν τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά του υδρογόνου και των υπόλοιπων αερίων καυσίμων. Παράλληλα έγινε μια αναφορά στην επίδραση της χημικής διάστασης στην σύνθεση του ατμοσφαιρικού αέρα (ξηρού ή υγρού) και διαπιστώθηκε ότι παρόλο τις μικρές σχετικά θερμοκρασίες γίνεται αισθητή η παρουσία ορισμένων προϊόντων διάστασης σ' αυτόν και ειδικά οξειδίων του αζώτου.

Το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation είναι αυτό χρησιμοποιείται ευρέως για υπολογισμούς σχεδίασης στους αεριοστροβίλους. Έτσι με τον κινητήρα GTAC αρχικά έγινε μια ανάλυση με το off-design deck για την επίδραση του μοντέλου χημικής διάστασης του Jet-A στους παραμέτρους σχεδίασης της μηχανής, από την οποία διατυπώθηκε ότι κυρίως λόγω της απόκλισης της T_{14} απαιτείται επανασχεδίαση της μηχανής για να ικανοποιήσουμε τις απαιτήσεις του αρχείου Engine_dp.dat στο σημείο σχεδίασης και έγινε μια εκτίμηση για τις αποκλίσεις που περιμένουμε κατά τη επανασχεδίαση στο design deck από το μοντέλο Jet-A(g) no dissociation. Έτσι στο design deck, όπου γίνεται η σχεδίαση της μηχανής με βάση τις παραμέτρους του αρχείου Engine_dp.dat, διαπιστώθηκε ότι η επίδραση της χημικής διάστασης κατά τη σχεδίαση της μηχανής είναι ιδιαίτερα σημαντική και δεν θα πρέπει να αμελείται ειδικά όταν κάνουμε υπολογισμούς για το θερμό κομμάτι της, ειδάλλως εισάγονται σημαντικές αποκλίσεις.

Συνοπτικά η διαδικασία που ακολουθήθηκε για τα δύο deck του κινητήρα GTAC φαίνεται στο σχήμα 4.35.

Αφού αποδείχθηκε ότι είναι απαραίτητη η μοντελοποίηση του εργαζόμενου μέσου σύμφωνα με το μοντέλο της πλήρης διάστασης έγινε μια επιπλέον μελέτη με το design deck του GTAC για να εξετάσουμε την επίδραση της σύνθεσης του καυσίμου στους υπολογισμούς σχεδίασης της μηχανής με βάση αναφοράς το μοντέλο Jet-A(g) dissociation αυτή τη φορά. Διαπιστώθηκε ότι από τις απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης, για τα καύσιμα JP-4, JP-5 και Jet-A(g) προκύπτει μηχανή με τα ίδια χαρακτηριστικά κάθε φορά. Επομένως η προκαταρκτική σχεδίαση μηχανής που θα χρησιμοποιεί καύσιμα τα JP-4 και JP-5 μπορεί να γίνει και με το μοντέλο του Jet-A(g) dissociation και εναλλάξ. Κάτι τέτοιο όμως δεν ισχύει για τα καύσιμα Diesel(g), Φυσικό αέριο, Μεθάνιο και Υδρογόνο και ειδικοί πίνακες με τις ιδιότητες του καυσαερίου τους θα πρέπει να αναπαράγονται προκειμένου να ελαχιστοποιούνται οι αποκλίσεις και να γίνεται ακριβέστερη σχεδίαση της μηχανής. Εν κατακλείδι βγήκε το συμπέρασμα ότι μια μηχανή που έχει σχεδιαστεί για λειτουργία με Jet-A καύσιμο μπορεί να δεχθεί απευθείας (από θερμοδυναμικής απόψεως) και χωρίς σημαντικές τροποποιήσεις τα καύσιμα JP-4 και JP-5 ενώ χρειάζονται ουσιώδεις μετατροπές σ' αυτή για ν' ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης με τα καύσιμα Φυσικό αέριο, Υδρογόνο και Μεθάνιο και λιγότερες με το Diesel.

Το τελευταίο θέμα που μας απασχόλησε ήταν τα εναλλακτικά καύσιμα στους αεριοστρόβιλους. Κατ' αρχήν συζητήθηκαν οι προοπτικές χρήσεις τους στις μηχανές αυτές σε βραχυπρόθεσμο, μεσοπρόθεσμο και μακροπρόθεσμο χρονικό ορίζοντα και τονίστηκαν τα πλεονεκτήματα αλλά και διάφορες δυσκολίες που έγκειται στην εφαρμογή τους.

Στη συνέχεια ακολούθησαν δύο μελέτες για δύο βιοντήζελ (από σογιέλαιο και λίπος κοτόπουλου) τα χαρακτηριστικά των οποίων ανακτήθηκαν από τη βιβλιογραφία. Η πρώτη είχε να κάνει με την μελέτη του καυσαερίου που προκύπτει από την καύση τους στο CEA. Συγκρίθηκαν με τα συμβατικά καύσιμα Jet-A και Diesel και αποδείχτηκε ότι λόγω της χαμηλότερης θερμοκρασίας καύσης τους παράγουν και πολύ λιγότερα NOx. Επίσης διαπιστώθηκε ότι εκλύουν και λιγότερο CO και ότι παρόλο που έχουν διαφορετική σύσταση τα δύο βιοντήζελ, οι ιδιότητες

του καυσαερίου τους είναι σχεδόν ίδιες. Τέλος έγινε μια δεύτερη μελέτη για την επίδραση που έχουν τα δύο αυτά βιοκαύσιμα στην επανασχεδίαση της μηχανής GTAC. Διαπιστώθηκε ότι όταν κάνουμε επανασχεδίαση της μηχανής με βάση τα δύο βιοντήζελ θα πρέπει να αναπαράγονται ειδικοί πίνακες που λαμβάνουν υπόψη τη σύσταση τους, αντί για το μοντέλο Jet-A(g) dissociation, ειδάλλως θα προκύψουν σημαντικές αποκλίσεις από την πραγματικότητα. Οι αποκλίσεις στην επανασχεδίαση της μηχανής εξετάσαμε ότι είναι μικρότερες για το πρώτο βιοντήζελ από το δεύτερο. Ωστόσο είδαμε ότι και στις δύο περιπτώσεις είναι αρκετά σημαντικές ώστε ν' απαιτούνται μετατροπές στην μηχανή για να χρησιμοποιηθούν άμεσα σ' αυτή σαν καύσιμα αντί για Jet-A και συγχρόνως να ικανοποιούνται οι απαιτήσεις του σημείου σχεδίασης.

Το βασικό συμπέρασμα που βγήκε είναι ότι μείγμα (drop-in fuel) συμβατικού καυσίμου όπως κηροζίνη ή diesel μαζί με κάποιο συνθετικό καύσιμο όπως το 1^ο βιοντήζελ έχει τη δυναμική για άμεση εφαρμογή στους υπάρχοντες κινητήρες χωρίς να χρειάζονται σημαντικές μετατροπές.

7. Βιβλιογραφία

1. Ημερίδα του ΚΑΠΕ, 'Eco-Building Club: Μελέτες και Εφαρμογές Καινοτόμων Ενεργειακών Τεχνολογιών σε Κτίρια', Δευτέρα 23 Νοεμβρίου 2009, Ξενοδοχείο AQUAMARINA, Μάτι Αττικής.
2. DLR, 'Air Transport Impact on Climate', German Aerospace Center, Koeln, May 2008.
3. Μαθιουδάκης Κ., 2007, 'Λειτουργία Αεριοστροβίλων και Ατμοστροβίλων', ΕΜΠ, Αθήνα 2007.
4. Τσαλαβούτας Αναστάσιος Δ., 2004, 'Ανάπτυξη Συστημάτων Παρακολούθησης Λειτουργίας Βιομηχανικών Αεριοστροβίλων', Διδακτορική Διατριβή, ΕΜΠ, Αθήνα 2004.
5. A. Tsalavoutas, M. Kelaidis, N. Thoma, K. Mathioudakis, 'Correlations adaptation for optimal emissions prediction', GT2007-27060, Proceedings of GT2007, ASME Turbo Expo 2007: Power for Land, Sea and Air, May 14-17, 2007, Montreal, Canada.
6. Stephen R. Turns, 'An Introduction to Combustion: Concepts and Applications', McGraw-Hill International Editions, Mechanical Engineering Series.
7. Gordon S., McBride B.J., Oct. 1994, 'Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium and Applications: Part I' NASA RP 1311.
8. Ρακόπουλος Κ., Χουντάλας Δ., 1998, 'Καύση – Ρύπανση Εμβολοφόρων Μ.Ε.Κ.', Φούντας, Αθήνα 1998.
9. Konstantinos G. Kyprianidis, Vishal Sethi, Stephen O.T. Ogaji, Pericles Pilidis, Riti Singh, Anestis I. Kalfas, 'Thermo-Fluid Modelling for Gas Turbines – Part I: Theoretical Foundation and Uncertainty Analysis', GT2009-60092, Proceedings of ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air, GT2009, June 8-12, 2009, Orlando, FL, USA.
10. Konstantinos G. Kyprianidis, Vishal Sethi, Stephen O.T. Ogaji, Pericles Pilidis, Riti Singh, Anestis I. Kalfas, 'Thermo-Fluid Modelling for Gas

- Turbines – Part II: Impact on Performance Calculations and Emissions Predictions at Aircraft System Level’, GT2009-60101, Proceedings of ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air, GT2009, June 8-12, 2009, Orlando, FL, USA.
11. W.P.J Visser, S.C.A Kluiters, ‘Modeling the effects of operating conditions and alternative fuels on gas turbine performance and emissions’, NLR-TP-98629, National Aerospace Laboratory NLR, December 1998.
 12. Reaction Design, ‘CHEMKIN 4.1 vs Chemkin II’.
 13. Reaction Design, ‘CHEMKIN-CFD QA’.
 14. http://www.reactiondesign.com/company/open_archive/news_20050218.htm.
 15. Deep Gupta, ‘Comparison of Combustion Calculations Using Cantera and Chemkin’, BTP Stage-I.
 16. Joachim Kurzke, ‘GasTurb 11: Design and Off-Design Performance of Gas Turbines’, Germany.
 17. Gordon S., McBride B.J., Jun. 1996, ‘Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium and Applications: Part II’ NASA RP 1311.
 18. Air BP, Handbook of Products
 19. http://en.wikipedia.org/wiki/Heat_of_combustion
 20. V. Sethi, “Advanced Performance Simulation of Gas Turbine Components and Fluid Thermodynamic Properties”, PhD Thesis, Department of Power and Propulsion, Cranfield University , 2008.
 21. Diara, F., Sept. 2007, “Advanced Performance Modelling of Fluid and Thermodynamic Functions for Gas Turbine Mixers and Nozzles”, MSc Thesis, School of Engineering, Department of Power and Propulsion, Cranfield University.
 22. <http://www.depa.gr/default.asp?pid=79&la=1>
 23. GIACC, U.S. Fuel Trends Analysis and Comparison to GIACC/4-IP/1 Group on International Aviation and Climate Change (GIACC), fourth Meeting, Montreal, May 2009.

24. David L. Daggett, Robert C. Hendricks, Rainer Walther, Edwin Corporan, 'Alternate Fuels for use in Commercial Aircraft', ISABE-2007-1196.
25. Heena V. Panchasara, Benjamin M. Simmons, Ajay K. Agrawal, Scott K. Spear, Daniel T. Daly, 'Combustion Performance of Biodiesel and Diesel-Vegetable Oil Blends in a Simulated Gas Turbine Burner', GT2008-51496, Proceedings of ASME Turbo Expo 2008: Power for Land, Sea and Air, GT2008, June 9-13, 2008, Berlin, Germany.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

Π1. Χημικά στοιχεία, ενώσεις και ιόντα στη βιβλιοθήκη thermo.lib του NASA CEA

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται τα:

- 1340 πιθανά προϊόντα της καύσης (περιέχει και αντιδρώντα που μπορεί να είναι και προϊόντα) με πρώτα αυτά που είναι στην αέρια φάση και δεύτερα αυτά που είναι συμπυκνωμένα (υγρά ή στερεά).
- 60 καθαρά και μόνο αντιδρώντα στοιχεία ή χημικές ενώσεις (οξειδωτικά ή καύσιμα)

που βρίσκονται στη βιβλιοθήκη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του NASA CEA (αρχείο thermo.lib).

ΧΗΜΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ NASA CEA

Πίνακας Π1.1: Ονόματα των προϊόντων αέριας φάσης στο αρχείο thermo.lib

e-	B-	BeF2	CF3Br
AL	BCL	BeH	CF3CL
AL+	BCL+	BeH+	CF4
AL-	BCLF	BeH2	CH
ALBO2	BCL2	BeI	CH+
ALBr	BCL2+	BeI2	CHBr3
ALBr3	BCL2-	BeN	CHCL
ALC	BCL3	BeO	CHCLBr2
ALCL	BF	BeOH	CHCL2
ALCL+	BF2	BeOH+	CHCL2Br
ALCLF	BF2+	BeO2H2	CHCL3
ALCLF+	BF2-	BeS	CHF
ALCLF2	BF3	Be2O	CHFBr2
ALCL2	BH	Be2OF2	CHFCL
ALCL2+	BHF2	Be2O2	CHFCLBr
ALCL2-	BH2	Be3O3	CHFCL2
ALCL2F	BH3	Be4O4	CHP2
ALCL3	BN	Be5O5	CHF2Br
ALF	BO	Be6O6	CHF2CL
ALF+	BOCL	Br	CHF3
ALF2	BOF	BrCL	CH2
ALF2+	BOF2	BrF	CH2Br2
ALF2-	BO2	BrF3	CH2CL
ALF2O	BO2-	BrF5	CH2CLBr
ALF2O-	BS	BrO	CH2CL2
ALF3	B2	Br2	CH2F
ALF4-	B2H6	C	CH2FBr
ALH	B2O	C+	CH2FCL
ALI	B2O2	C-	CH2F2
ALI3	B2O3	CBr	CH3
ALN	B3O3CL3	CBr2	CH3Br
ALO	B3O3F3	CBr3	CH3CL
ALO+	B3O3H3	CBr4	CH3F
ALO-	Ba	CCL	CH2OH
ALOCL	BaBr	CCLBr3	CH3O
ALOF	BaBr2	CCL2	CH4
ALOH	BaCL	CCL2Br2	CH3OH
ALOH+	BaCL2	CCL3	CI
ALOH-	BaF	CCL3Br	CN
ALO2	BaF+	CCL4	CN+
ALO2-	BaF2	CF	CN-
ALO2H	BaOH	CF+	CNN
ALS	BaOH+	CFBr3	CO
AL2	BaO2H2	CFCL	CO+
AL2Br6	BaS	CFCLBr2	COCL
AL2CL6	Be	CFCL2	COCL2
AL2F6	Be+	CFCL2Br	COF
AL2I6	Be++	CFCL3	COFCL
AL2O	BeBO2	CF2	COF2
AL2O+	BeBr	CF2+	COHCL
AL2O2	BeBr2	CF2Br2	COHF
AL2O2+	BeCL	CF2CL	COS
Ar	BeCL+	CF2CLBr	CO2
Ar+	BeCLF	CF2CL2	CO2+
B	BeCL2	CF3	COOH
B+	BeF	CF3+	CP

Πίνακας Π1.1: Συνέχεια

CS	C3H5, allyl	C7H15, n-heptyl	Cs2CL2
CS2	C3H6, propylene	C7H16, 2-methylh	Cs2F2
C2	C3H6, cyclo-	C7H16, n-heptane	Cs2O
C2+	C3H6O, propyle-o	C8H8, styrene	Cs2O2H2
C2-	C3H7, n-propyl	C8H10, ethylbenz	Cs2SO4
C2CL	C3H7, i-propyl	C8H16, 1-octene	Cu
C2CL2	C3H8	C8H17, n-octyl	Cu+
C2CL3	C3H8O, 1propanol	C8H18, n-octane	CuCL
C2CL4	C3H8O, 2propanol	C8H18, isooctane	CuF
C2CL6	C3O2	C9H19, n-nonyl	CuF2
C2F	C4	C10H8, naphthale	CuO
C2FCL	C4H2	C10H21, n-decyl	Cu2
C2FCL3	C4H4, 1, 3-cyclo-	C12H9, o-bipheny	Cu3CL3
C2F2	C4H6, butadiene	C12D9, o-bipheny	D
C2F2CL2	C4H6, 1-butyne	C12H10, biphenyl	D+
C2F3	C4H6, 2-butyne	C12D10, biphenyl	D-
C2F3CL	C4H6, cyclo-	Ca	DBr
C2F4	C4H8, 1-butene	Ca+	DCL
C2F6	C4H8, cis2-buten	CaBr	DF
C2H	C4H8, tr2-butene	CaBr2	DOCL
C2HCL	C4H8, isobutene	CaCL	DO2
C2HCL3	C4H8, cyclo-	CaCL2	DO2-
C2HF	(CH3COOH)2	CaF	D2
C2HFCL2	C4H9, n-butyl	CaF2	D2+
C2HF2CL	C4H9, i-butyl	CaI	D2-
C2HF3	C4H9, s-butyl	CaI2	D2O
CHCO, ketyl	C4H9, t-butyl	CaO	D2O2
C2H2, vinylidene	C4H10, isobutane	CaOH	D2S
C2H2, acetylene	C4H10, n-butane	CaOH+	F
C2H2CL2	C4N2	CaO2H2	F+
C2H2FCL	C5	CaS	F-
C2H2F2	C5H6, 1, 3cyclo-	Ca2	FCN
CH2CO, ketene	C5H8, cyclo-	CL	FO
C2H3, vinyl	C5H10, 1-pentene	CL+	FO2
C2H3CL	C5H10, cyclo-	CL-	F2
C2H3F	C5H11, pentyl	CLCN	F2O
CH3CN	C5H11, t-pentyl	CLF	FS2F, fluorodisu
CH3CO, acetyl	C5H12, n-pentane	CLF3	Fe
C2H4	C5H12, i-pentane	CLF5	Fe+
C2H4O, ethylen-o	CH3C(CH3)2CH3	CLO	Fe-
CH3CHO, ethanal	C6H2	CLO2	FeC5O5
CH3COOH	C6H5, phenyl	CL2	FeCL
C2H5	C6D5, phenyl	CL2O	FeCL2
C2H6	C6H5O, phenoxy	Cr	FeCL3
CH3N2CH3	C6H6	CrN	FeO
C2H5OH	C6D6	CrO	Fe(OH)2
CH3OCH3	C6H5OH, phenol	CrO2	Fe2CL4
CCN	C6H10, cyclo-	CrO3	Fe2CL6
CNC	C6H12, 1-hexene	Cs	GeBr
C2N2	C6H12, cyclo-	Cs+	GeBr2
C2O	C6H13, n-hexyl	CsCL	GeBr3
C3	C6H14, n-hexane	CsF	GeBr4
C3H3, propargyl	C7H7, benzyl	CsO	GeCL
C3H4, allene	C7H8	CsOH	GeCL2
C3H4, propyne	C7H8O, cresol-mx	CsOH+	GeCL3
C3H4, cyclo-	C7H14, 1-heptene	Cs2	GeCL4

ΧΗΜΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ NASA CEA

Πίνακας Π1.1: Συνέχεια

GeF	H3F3	Li2SO4	NO2-
GeF2	H3O+	Li3CL3	NO2CL
GeF3	(HCOOH)2	Li3F3	NO2F
GeF4	H4F4	Mg	NO3
GeI	H5F5	Mg+	NO3-
GeO	H6F6	MgBr	NO3F
GeO2	H7F7	MgBr2	N2
GeS	He	MgCL	N2+
GeS2	He+	MgCL+	N2-
Ge2	Hg	MgCLF	NCN
H	HgBr2	MgCL2	cis-N2D2
H+	I	MgF	N2F2
H-	IP5	MgF+	N2F4
HALO	IP7	MgF2	N2H2
HBO	I2	MgF2+	NH2NO2
HBO+	K	MgH	N2H4
HBO-	K+	MgI	N2O
HBO2	KBO2	MgI2	N2O+
HBS	KCN	MgN	N2O3
HBS+	KCL	MgO	N2O4
HBr	KF	MgOH	N2O5
HCN	KF2-	MgOH+	N3
HCO	KH	MgO2H2	N3H
HCO+	KO	MgS	Na
HCCN	KO-	Mg2	Na+
HCL	KOH	Mg2F4	NaALF4
HD	KOH+	MoO3	NaBO2
HD+	K2	Mo2O6	NaBr
HD-	K2C2N2	Mo3O9	NaCN
HDO	K2CL2	Mo4O12	NaCL
HDO2	K2F2	Mo5O15	NaF
HF	K2O2H2	N	NaF2-
HI	K2SO4	N+	NaH
HNC	Kr	N-	NaI
HNCO	Kr+	NCO	NaO
HNO	Li	ND	NaO-
HNO2	Li+	ND2	NaOH
HNO3	LiALF4	ND3	NaOH+
HOCL	LiBO2	NF	Na2
HOF	LiCL	NF2	Na2C2N2
HO2	LiF	NF3	Na2CL2
HO2-	LiFO	NH	Na2F2
HPO	LiF2-	NH+	Na2O
HSO3F	LiH	NHF	Na2O2H2
H2	LiN	NHF2	Na2SO4
H2+	LiO	NH2	Nb
H2-	LiO-	NH2F	NbO
HCHO, formaldehy	LiOH	NH3	NbO2
HCOOH	LiOH+	NH2OH	Ne
H2F2	LION	NH4+	Ne+
H2O	Li2	NO	Ni
H2O+	Li2CL2	NO+	NiCL
H2O2	Li2F2	NOCL	NiCL2
H2S	Li2O	NOF	NiO
H2SO4	Li2O2	NOF3	NiS
H3B3O6	Li2O2H2	NO2	O

ΧΗΜΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ NASA CEA

Πίνακας Π1.1: Ολοκληρωμένος

O+	PbBr	SO2F2	Si2
O-	PbBr2	SO3	Si2C
OD	PbBr3	S2	Si2N
OD-	PbBr4	S2-	Si3
OH	PbCL+	S2F2, thiothiony	SnBr3
OH+	PbCL2	S2O	SnBr4
OH-	PbCL2+	S3	SnCL2
O2	PbCL3	S4	SnCL3
O2+	PbCL4	S5	SnCL4
O2-	PbF	S6	SnF2
O3	PbF2	S7	SnF3
P	PbF3	S8	SnF4
P+	PbF4	Si	SnO2
PCL	PbI	Si+	SnS2
PCL2	PbI2	SiBr	Sr
PCL2-	PbI3	SiBr2	SrBr
PCL3	PbI4	SiBr3	SrCL
PCL5	PbO	SiBr4	SrCL2
PF	PbO2	SiC	SrF
PF+	PbS	SiC2	SrF+
PF-	PbS2	SiC4H12	SrF2
PFCL	Pb2	SiCL	SrI2
PFCL-	S	SiCL2	SrO
PFCL2	S+	SiCL3	SrOH
PFCL4	S-	SiCL4	SrOH+
PF2	SCL	SiF	SrO2H2
PF2-	SCL2	SiFCL	SrS
PF2CL	SCL2+	SiF2	Ta
PF2CL3	SD	SiF3	Ta+
PF3	SF	SiF4	TaO
PF3CL2	SF+	SiH	TaO2
PF4CL	SF-	SiH+	Ti
PF5	SF2	SiHBr3	Ti+
PH	SF2+	SiHCL	Ti-
PH2	SF2-	SiHCL3	TiCL
PH2-	SF3	SiHF	TiCL2
PH3	SF3+	SiHF3	TiCL3
PN	SF3-	SiHI3	TiCL4
PO	SF4	SiH2	TiO
PO-	SF4+	SiH2Br2	TiOCL
POCL3	SF4-	SiH2CL2	TiOCL2
POFCL2	SF5	SiH2F2	TiO2
POF2CL	SF5+	SiH2I2	V
POF3	SF5-	SiH3	VCL4
PO2	SF6	SiH3Br	VN
PO2-	SF6-	SiH3CL	VO
PS	SH	SiH3F	VO2
P2	SH-	SiH3I	Xe
P2O3	SN	SiH4	Xe+
P2O4	SO	SiI	Zn
P2O5	SO-	SiI2	Zn+
P3	SOF2	SiN	Zn-
P4	SO2	SiO	Zr
P4O6	SO2-	SiO2	ZrN
P4O10	SO2CLF	SiS	ZrO
Pb	SO2CL2	SiS2	ZrO2

Πίνακας Π1.2: Ονόματα των προϊόντων συμπυκνωμένης φάσης στο αρχείο thermo.lib

Ag(cr)	BeS(s)	CuO(s)	KO2(s)
Ag(L)	Be2C(s)	CuO2H2(s)	K2CO3(s)
AL(cr)	Be2C(L)	CuSO4(s)	K2CO3(L)
AL(L)	Br2(cr)	Cu2O(s)	K2O(s)
ALBr3(s)	Br2(L)	Cu2O(L)	K2O2(s)
ALBr3(L)	C(gr)	Cu2O5S(s)	K2S(1)
ALCL3(s)	Ca(a)	Fe(a)	K2S(2)
ALCL3(L)	Ca(b)	Fe(a)	K2S(3)
ALF3(a)	Ca(L)	Fe(c)	K2S(L)
ALF3(b)	CaBr2(s)	Fe(d)	K2SO4(a)
ALF3(L)	CaBr2(L)	Fe(L)	K2SO4(b)
ALI3(s)	CaCO3(caL)	FeC5O5(L)	K2SO4(L)
ALI3(L)	CaCL2(s)	FeCL2(s)	Li(cr)
ALN(s)	CaCL2(L)	FeCL2(L)	Li(L)
AL2O3(a)	CaF2(a)	FeCL3(s)	LiALO2(s)
AL2O3(L)	CaF2(b)	FeCL3(L)	LiALO2(L)
AL2SiO5(an)	CaF2(L)	FeO(s)	LiCL(s)
AL6Si2O13(s)	CaO(s)	FeO(L)	LiCL(L)
B(b)	CaO(L)	Fe(OH)2(s)	LiF(s)
B(L)	CaO2H2(s)	Fe(OH)3(s)	LiF(L)
BN(s)	CaS(s)	FeS(a)	LiH(s)
B2O3(L)	CaSO4(s)	FeS(b)	LiH(L)
B3O3H3(cr)	Cd(cr)	FeS(c)	LiOH(s)
Ba(cr)	Cd(L)	FeS(L)	LiOH(L)
Ba(L)	Co(a)	FeSO4(s)	Li2O(s)
BaBr2(s)	Co(b)	FeS2(s)	Li2O(L)
BaBr2(L)	Co(b)	Fe2O3(s)	Li2SO4(a)
BaCL2(a)	Co(L)	Fe2S3O12(s)	Li2SO4(b)
BaCL2(b)	Cr(cr)	Fe3O4(s)	Li2SO4(L)
BaCL2(L)	Cr(cr)	Ge(cr)	Li3N(s)
BaF2(a)	Cr(cr)	Ge(L)	Mg(cr)
BaF2(b, c)	Cr(L)	H2O(s)	Mg(L)
BaF2(L)	CrN(s)	H2O(L)	MgAL2O4(s)
BaO(s)	Cr2N(s)	H2SO4(L)	MgAL2O4(L)
BaO(L)	Cr2O3(s)	Hg(cr)	MgBr2(s)
BaO2H2(s)	Cr2O3(L)	Hg(L)	MgBr2(L)
BaO2H2(L)	Cs(cr)	HgBr2(s)	MgCO3(s)
BaS(s)	Cs(L)	HgBr2(L)	MgCL2(s)
Be(a)	CsCL(a)	HgO(s)	MgCL2(L)
Be(b)	CsCL(b)	I2(cr)	MgF2(s)
Be(L)	CsCL(L)	I2(L)	MgF2(L)
3eAL2O4(s)	CsF(s)	K(cr)	MgI2(s)
3eAL2O4(L)	CsF(L)	K(L)	MgI2(L)
3eBr2(s)	CsOH(a)	KCN(s)	MgO(s)
3eCL2(s)	CsOH(b)	KCN(L)	MgO(L)
3eCL2(L)	CsOH(c)	KCL(s)	MgO2H2(s)
3eF2(Lqz)	CsOH(L)	KCL(L)	MgS(s)
3eF2(hqz)	Cs2SO4(II)	KF(s)	MgSO4(s)
3eF2(L)	Cs2SO4(I)	KF(L)	MgSO4(L)
3eI2(s)	Cs2SO4(L)	KHP2(a)	MgSiO3(I)
3eI2(L)	Cu(cr)	KHP2(b)	MgSiO3(II)
3eO(a)	Cu(L)	KHP2(L)	MgSiO3(III)
3eO(b)	CuF(s)	KOH(a)	MgSiO3(L)
3eO(L)	CuF2(s)	KOH(b)	MgTiO3(s)
3eO2H2(b)	CuF2(L)	KOH(L)	MgTiO3(L)

Πίνακας Π1.2: Ολοκληρωμένος

MgTi2O5 (s)	NbO (s)	SiO2 (b-qz)	Ti (b)
MgTi2O5 (L)	NbO (L)	SiO2 (b-crt)	Ti (L)
Mg2SiO4 (s)	NbO2 (I)	SiO2 (L)	TiC (s)
Mg2SiO4 (L)	NbO2 (II)	SiS (cr)	TiC (L)
Mg2TiO4 (s)	NbO2 (III)	SiS (L)	TiCL2 (s)
Mg2TiO4 (L)	NbO2 (L)	SiS2 (cr)	TiCL3 (s)
Mn (a)	Nb2O5 (s)	SiS2 (L)	TiCL4 (L)
Mn (b)	Nb2O5 (L)	Si2N2O (s)	TiN (s)
Mn (c)	Ni (cr)	Si3N4 (cr)	TiN (L)
Mn (d)	Ni (cr)	Sn (cr)	TiO (a)
Mn (L)	Ni (L)	Sn (L)	TiO (b)
Mo (cr)	NiS (b)	SnBr2 (s)	TiO (L)
Mo (L)	NiS (a)	SnBr2 (L)	TiO2 (ru)
NH4CL (a)	NiS (L)	SnBr4 (s)	TiO2 (L)
NH4CL (b)	NiS2 (s)	SnBr4 (L)	Ti2O3 (a)
NH4F (cr)	NiS2 (L)	SnCL2 (s)	Ti2O3 (b)
NH4F (L)	Ni3S2 (I)	SnCL2 (L)	Ti2O3 (L)
Na (cr)	Ni3S2 (II)	SnCL4 (L)	Ti3O5 (a)
Na (L)	Ni3S2 (L)	SnCL4 (L)	Ti3O5 (b)
NaAlO2 (a)	Ni3S4 (s)	SnF2 (s)	Ti3O5 (L)
NaAlO2 (b)	P (cr)	SnF2 (L)	Ti4O7 (s)
NaBr (s)	P (L)	SnI2 (s)	Ti4O7 (L)
NaBr (L)	P4O10 (cr)	SnI2 (L)	U (a)
NaCN (s)	P4O10 (L)	SnI4 (s)	U (b)
NaCN (L)	Pb (cr)	SnI4 (L)	U (c)
NaCL (s)	Pb (L)	SnO (s)	U (L)
NaCL (L)	PbBr2 (s)	SnO (L)	V (cr)
NaF (s)	PbBr2 (L)	SnO2 (s)	V (L)
NaF (L)	PbCL2 (s)	SnO2 (L)	VCL2 (s)
NaI (s)	PbCL2 (L)	SnS (rh)	VCL3 (s)
NaI (L)	PbF2 (II)	SnS (cu)	VCL4 (L)
NaOH (a)	PbF2 (I)	SnS (L)	VN (s)
NaOH (L)	PbF2 (L)	SnS2 (s)	VO (s)
NaO2 (s)	PbI2 (s)	Sr (a)	VO (L)
Na2CO3 (I)	PbI2 (L)	Sr (b)	V2O3 (s)
Na2CO3 (II)	PbO (II-r)	Sr (L)	V2O3 (L)
Na2CO3 (L)	PbO (I-y)	SrCL2 (a)	V2O4 (I)
Na2O (c)	PbO (L)	SrCL2 (b)	V2O4 (II)
Na2O (a)	PbO2 (s)	SrCL2 (L)	V2O4 (L)
Na2O (L)	PbS (s)	SrF2 (s)	V2O5 (s)
Na2O2 (a)	PbS (L)	SrF2 (L)	V2O5 (L)
Na2O2 (b)	Pb2O3 (s)	SrO (s)	W (cr)
Na2S (1)	Pb3O4 (s)	SrO (L)	W (L)
Na2S (2)	Rb (cr)	SrO2H2 (s)	Zn (cr)
Na2S (L)	Rb (L)	SrO2H2 (L)	Zn (L)
Na2SO4 (V)	S (cr1)	SrS (s)	ZnSO4 (a)
Na2SO4 (IV)	S (cr2)	Ta (cr)	ZnSO4 (a)
Na2SO4 (I)	S (L)	Ta (L)	ZnSO4 (b)
Na2SO4 (L)	SCL2 (L)	TaC (s)	Zr (a)
Na3ALF6 (a)	S2CL2 (L)	TaC (L)	Zr (b)
Na3ALF6 (b)	Si (cr)	Ta2O5 (s)	Zr (L)
Na3ALF6 (L)	Si (L)	Ta2O5 (L)	ZrN (s)
Na5AL3F14 (s)	SiC (b)	Th (a)	ZrN (L)
Na5AL3F14 (L)	SiC (b)	Th (b)	ZrO2 (a)
Nb (cr)	SiC (L)	Th (L)	ZrO2 (b)
Nb (L)	SiO2 (a-qz)	Ti (a)	ZrO2 (L)

Πίνακας Π1.3: Ονόματα των αντιδρώντων στο αρχείο thermo.lib

Air	Jet-A(g)
B2H6(L)	Jet-A(L)
B5H9(L)	CLF3(L)
(CH2) _x (s)	CLO3F
CH3NO2(L)	CLO3F(L)
CH4(L)	CL2(L)
CH3OH(L)	F2(L)
CH6N2(L)	F2O(L)
C2H2(L), acetylene	JP-4
CH3CN(L)	JP-5
C2H4(L)	HNO3(L)
C2H4O(L), ethylene	IRPNA
C2H6(L)	H2(L)
C2H5OH(L)	H2O2(L)
C2H8N2(L), UDMH	LiCLO4(s)
C2N2(L)	NF3(L)
C3H6(L), propylene	NH3(L)
C3H7NO3(L)	NH4CLO4(I)
C3H8(L)	NH4CLO4(II)
C4H8(L), 1-butene	NH4NO3(IV)
C4H10(L), n-butane	NH4NO3(III)
C4H10(L), isobutane	NH4NO3(II)
C5H12(L), n-pentane	NH4NO3(I)
C6H6(L)	NH4NO3(L)
C6H5NH2(L)	N2(L)
C6H14(L), n-hexane	N2H4(L)
C7H8(L)	N2O4(L)
C7H16(L), n-heptane	O2(L)
C8H18(L), n-octane	O3(L)
C8H18(L), isooctane	

Π2. Υπορουτίνες του NASA CEA

Ο κώδικας `cea2.for` είναι η «καρδιά» του προγράμματος CEA και αποτελείται από τα εξής:

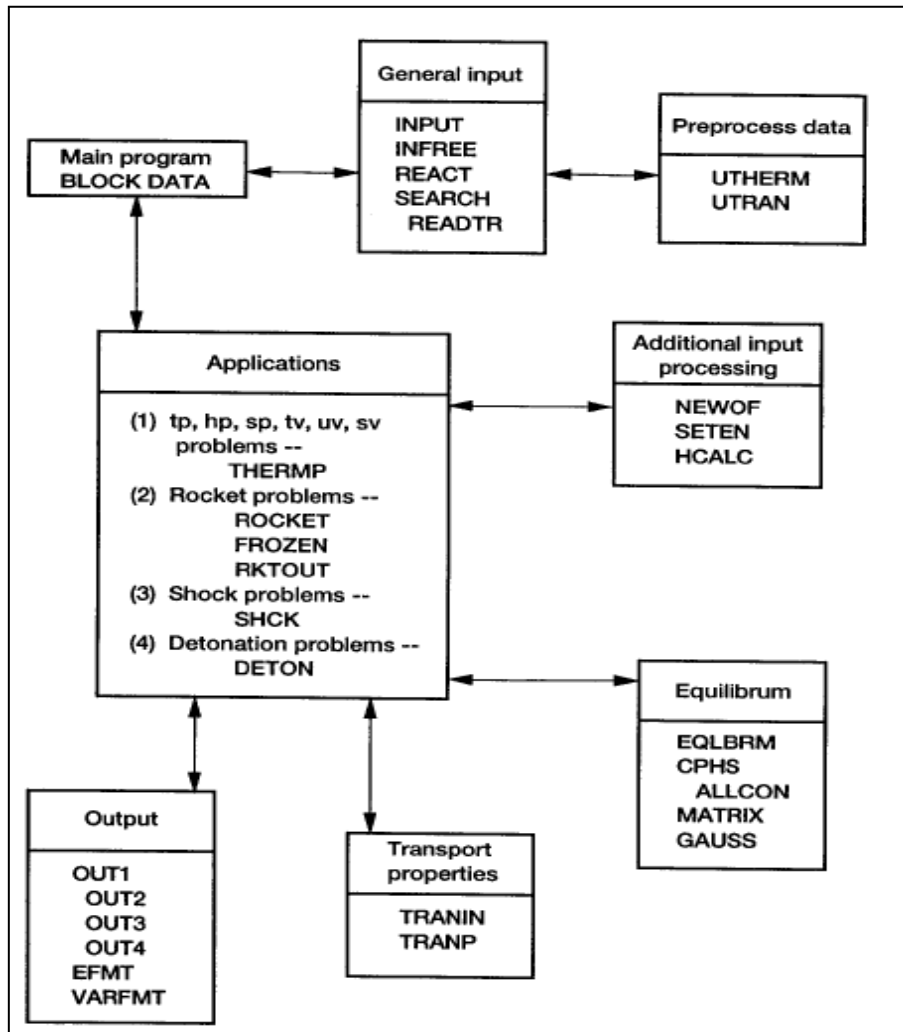
- Το κυρίως πρόγραμμα
- Το μπλοκ δεδομένων (`blockdata`)
- 24 υπορουτίνες
- 5 καταχωρήσεις (`entries`)

Όλα τα παραπάνω είναι οργανωμένα σε 8 τομείς για να γίνεται εφικτό από το χρήστη να προσθέτει ή να αφαιρεί εφαρμογές. Οι τομείς αυτοί έχουν να κάνουν με:

- τη γενική επεξεργασία του αρχείου εισόδου (`general input`)
- την προεπεξεργασία των θερμοδυναμικών δεδομένων και των δεδομένων μεταφοράς θερμότητας (`preprocessing of thermodynamic and thermal transport property data`)
- τη συμπληρωματική επεξεργασία δεδομένων εισόδου (`additional input processing`)
- 4 εφαρμογές
- υπολογισμούς ισορροπίας (`equilibrium calculations`)
- υπολογισμούς ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας (`thermal transport property calculations`)
- τα αποτελέσματα (`output`)

Η γενική ροή μεταξύ των τομέων αλλά και οι υπορουτίνες που σχετίζονται με τον καθένα φαίνονται στο σχήμα Π2.1.

Ακολούθως γίνεται μια ανάλυση του ρόλου που επιτελεί κάθε τομέας στο πρόγραμμα και περιγράφονται οι υπορουτίνες που περικλείει ο καθένας.



Σχήμα Π2.1: Τομείς και υπορουτίνες του NASA CEA

Π2.1 Τομέας κυρίως προγράμματος και μπλοκ δεδομένων

Π2.1.1 Κυρίως πρόγραμμα

Το κυρίως πρόγραμμα του κώδικα cea2.for περιέχει μεταξύ των άλλων τις δηλώσεις OPEN και CLOSE για να προσδιορίσει όλους τους αριθμούς των μονάδων εισόδου/εξόδου και τα αντίστοιχα αρχεία για όλο το πρόγραμμα. Επίσης:

- Καλεί την υπορουτίνα INPUT να διαβάσει και να επεξεργαστεί τα δεδομένα του αρχείου εισόδου.

- Καλεί την υπορουτίνα SEARCH να διαβάσει και να αποθηκεύσει θερμοδυναμικά δεδομένα από τη βιβλιοθήκη thermo.lib κατάλληλα για το συγκεκριμένο χημικό σύστημα.
- Καλεί την καταχώρηση READTR της υπορουτίνας SEARCH εάν η επιλογή για υπολογισμό των ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας βρίσκεται στο αρχείο εισόδου. Τα μεγέθη αυτά διαβάζονται από τη βιβλιοθήκη trans.lib και τα επιλεγμένα δεδομένα για το συγκεκριμένο χημικό σύστημα αποθηκεύονται στη μονάδα εισόδου/εξόδου IOSCH.
- Καθορίζει τις αρχικές εκτιμήσεις για το συνολικό αριθμό των moles ανά γραμμάριο του μείγματος των προϊόντων καθώς και των επιμέρους αριθμών των moles για κάθε συστατικό του μείγματος των προϊόντων.
- Εισάγει συμπυκνωμένα στοιχεία που θα ληφθούν υπόψη ως πιθανά προϊόντα (insert).
- Καλεί τις εφαρμογές THERMP, ROCKET, SHCK ή DETON σύμφωνα με τον τύπο του προβλήματος που καθορίζεται στο αρχείο εισόδου.

Η ροή επιστρέφει στο κυρίως πρόγραμμα μετά την επίλυση ενός προβλήματος ή όταν έχει συμβεί κάποιο κρίσιμο λάθος.

Π2.1.2 Μπλοκ δεδομένων

Το μπλοκ δεδομένων περιέχει τους ακόλουθους τύπους δεδομένων που παραμένουν σταθερά ανεξάρτητα από το εκάστοτε πρόβλημα:

- Θεμελιώδεις σταθερές (Cohen, 1987)
- Δεδομένα για τα χημικά στοιχεία όπως οι χημικοί συμβολισμοί και τα ατομικά βάρη
- Αρχική διαμόρφωση του πίνακα μεταβλητής μορφής Fmt. Ο πίνακας αυτός χρησιμοποιείται για να καθορίσει τον αριθμό των δεκαδικών ψηφίων στα τελικά αποτελέσματα σύμφωνα με το μέγεθος των αριθμών.

Π2.2 Τομέας προεπεξεργασίας δεδομένων

Ο τομέας προεπεξεργασίας δεδομένων αποτελείται από δύο υπορουτίνες:

- Την υπορουτίνα U THERM, η οποία καλείται από την υπορουτίνα INPUT, και η οποία διαβάζει τα μορφοποιημένα δεδομένα από το αρχείο thermo.inp, τα επεξεργάζεται και αποθηκεύει τα αποτελέσματα μη μορφοποιημένα στο αρχείο thermo.lib.
- Την υπορουτίνα U TRAN, η οποία καλείται από την υπορουτίνα INPUT σε περίπτωση που έχουμε ζητήσει στο αρχείο εισόδου να υπολογιστούν τα μεγέθη μεταφοράς θερμότητας, και η οποία διαβάζει τα μορφοποιημένα δεδομένα από το αρχείο trans.inp, τα επεξεργάζεται και αποθηκεύει τα αποτελέσματα μη μορφοποιημένα στο αρχείο trans.lib.

Για κάθε πρόβλημα οι βιβλιοθήκες αυτές ερευνώνται από τις υπορουτίνες για τα κατάλληλα δεδομένα του συγκεκριμένου χημικού συστήματος.

Οι υπορουτίνες αυτές όπως φαίνεται και από το σχήμα Π2.1 δεν έχουν άλλη σύνδεση με το υπόλοιπο του κώδικα cea2.for και επομένως θα μπορούσαν να αποτελούν και χωριστό πρόγραμμα που θα χρησίμευε απλά στην προεπεξεργασία των δύο αυτών βιβλιοθηκών.

Π2.3 Τομέας γενικής επεξεργασίας αρχείου εισόδου

Ο τομέας αυτός αποτελείται από τέσσερις υπορουτίνες INPUT, SEARCH, INFREE και REACT και την καταχώρηση READTR της υπορουτίνας SEARCH.

Η υπορουτίνα INPUT είναι υπεύθυνη για να διαβάσει και να επεξεργαστεί το αρχείο εισόδου. Αυτό το επιτυγχάνει μέσω των υπορουτινών INFREE, SEARCH & REACT καθώς και των U THERM και U TRAN που είδαμε προηγουμένως.

Η υπορουτίνα INFREE καλείται από την INPUT για να μετατρέψει τα ελεύθερης μορφοποίησης δεδομένα του αρχείου εισόδου σε χαρακτήρες και αριθμητικές τιμές.

Η υπορουτίνα SEARCH καλείται από την INPUT για να ψάξει στο αρχείο thermo.lib για θερμοδυναμικά δεδομένα πιθανών προϊόντων κατάλληλα για το συγκεκριμένο χημικό σύστημα. Τα δεδομένα για αυτά τα στοιχεία θα αποθηκευτούν με εξαιρέσεις τις περιπτώσεις που έχουμε κάποια εντολή only ή omit. Επίσης εάν

έχουμε δώσει εντολή στο αρχείο εισόδου να γίνει υπολογισμός των ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας τότε η καταχώρηση READTR καλείται για να διαβάσει τις ιδιότητες αυτές από το αρχείο trans.lib. Όλα τα παραπάνω δεδομένα όπως οι θερμοδυναμικοί συντελεστές $\alpha_1, \alpha_2, \dots$, οι συντελεστές μεγεθών μεταφοράς θερμότητας A, B, C & D, τα ονόματα των στοιχείων και οι στοιχειομετρικοί συντελεστές αποθηκεύονται στο αρχείο IOSCH για χρήση στους υπολογισμούς του μείγματος των προϊόντων.

Η υπορουτίνα REACT καλείται από την INPUT για περαιτέρω επεξεργασία των δεδομένων των αντιδρώντων από το αρχείο thermo.lib. Ο ρόλος που επιτελεί η REACT για κάθε αντιδρών είναι:

- Ψάχνει στο αρχείο thermo.lib για στοιχεία με το ίδιο όνομα όπως το αντιδρών στην περίπτωση που κάποιο από τα παρακάτω είναι αλήθεια:
 - Λείπει ο μοριακός τύπος
 - Λείπει η τιμή της απόλυτης ενθαλπίας για ένα hr πρόβλημα
 - Λείπει η τιμή της εσωτερικής ενέργειας για ένα un πρόβλημα

Στην περίπτωση που στο thermo.lib υπάρχουν δεδομένα για μια μόνο θερμοκρασία (συνήθως θερμοκρασία αλλαγής φάσης ή 298.15K), η θερμοκρασία που δίνεται στο αρχείο εισόδου θα πρέπει να απέχει το πολύ 10K από την τιμή της βιβλιοθήκης. Στην αντίθετη περίπτωση θα εμφανισθεί μήνυμα λάθους.

- Υπολογίζει την ενθαλπία ή την εσωτερική ενέργεια από τους συντελεστές που βρίσκονται στη βιβλιοθήκη thermo.lib για τις περιπτώσεις όπου λείπει η τιμή της ενθαλπίας ή της εσωτερικής ενέργειας αντίστοιχα.
- Για κάθε νέο χημικό στοιχείο του συγκεκριμένου προβλήματος ανακτά τα χημικά σύμβολα και τα ατομικά βάρη από το μπλοκ δεδομένων.
- Υπολογίζει τα μοριακά βάρη του ολικού οξειδωτικού και ολικού καυσίμου
- Προσδιορίζει εάν το αντιδρών είναι οξειδωτικό [oxid], καύσιμο [fu] ή τίποτα από τα δυο [na]. Τα αντιδρώντα που χαρακτηρίζονται ως fu ή na αντιμετωπίζονται παρόμοια κατά τη διάρκεια της περαιτέρω επεξεργασίας. Οι

μεταβλητές του προγράμματος που σχετίζονται με οξειδωτικά καταχωρούνται με τον αριθμό 1 και με 2 αυτές που σχετίζονται με καύσιμα.

- Προσθέτει τη συμμετοχή των επιμέρους αντιδρώντων στις ιδιότητες του ολικού οξειδωτικού ή του ολικού καυσίμου. Έτσι εάν υπάρχουν πολλά αντιδρώντα με το χαρακτηρισμό fu ή na οι ιδιότητες τους συνδυάζονται για να καταλήξουμε στις ιδιότητες του ολικού καυσίμου χρησιμοποιώντας τη σχετική τους αναλογία που δίνεται στο αρχείο εισόδου. Το αντίστοιχο γίνεται και για τα οξειδωτικά.

Αφού ολοκληρώσουν οι υπορουτίνες τις παραπάνω διαδικασίες ο έλεγχος μεταφέρεται στο κυρίως πρόγραμμα.

Π2.4 Τομέας εφαρμογών

Ο τομέας των εφαρμογών αποτελείται από έξι υπορουτίνες THERMP, ROCKET, SHCK, DETON, FROZEN και RKTOUT. Οι τέσσερις πρώτες υπορουτίνες καλούνται από το κυρίως πρόγραμμα ανάλογα με τον τύπο του προβλήματος που έχει καθορισθεί στο αρχείο εισόδου.

Οι υπορουτίνες ROCKET, FROZEN και RKTOUT σχετίζονται με προβλήματα εκτόξευσης πυραύλων, η υπορουτίνα SHCK με προβλήματα κρουστικών κυμάτων και η DETON με προβλήματα εκρήξεων. Επειδή οι εφαρμογές αυτές δεν μας απασχόλησαν κατά την επεξεργασία της διπλωματικής δεν θα επεκταθούμε περαιτέρω σ' αυτές. Απλά θα αναφέρουμε ότι μπορούμε να διαγράψουμε εάν θέλουμε κάποια από αυτές (ή και όλες) τις εφαρμογές διαγράφοντας τις δηλώσεις που καλούν τις υπορουτίνες ROCKET ή SHCK ή DETON και στη συνέχεια διαγράφοντας την (ή τις) υπορουτίνες από τον τομέα των εφαρμογών. Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τις υπορουτίνες αυτές και τα προβλήματα που επιλύουν παραπέμπουμε στις αναφορές [7] & [17]. Στη συνέχεια αναλύεται μόνο η υπορουτίνα THERMP.

Η υπορουτίνα THERMP καλείται από το κυρίως πρόγραμμα για επιλύσει τα tr, hp, sp, tv, un και sv προβλήματα. Επειδή η υπορουτίνα EQLBRM που θα δούμε παρακάτω υπολογίζει τη σύσταση ισορροπίας και τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του μείγματος των προϊόντων για ένα σημείο κάθε φορά, η υπορουτίνα THERMP

προετοιμάζει τις απαραίτητες παραμέτρους για όλα τα προβλήματα κάτι που υπολογιστικά γίνεται με 3 βρόγχους DO:

- Ο εξωτερικός βρόγχος περιλαμβάνει όλους τους συνδυασμούς των λόγων οξειδωτικού-καυσίμου και αφορά όλα τα προβλήματα. Για καθένα από τους λόγους αυτούς καλείται η υπορουτίνα NEWOF για να υπολογίσει τις ιδιότητες του μείγματος των αντιδρώντων.
- Ο επόμενος βρόγχος αφορά τις καθορισμένες πιέσεις για tp, hp και sp προβλήματα ή τους καθορισμένους όγκους (ή πυκνότητες) για tv, uv ή sv προβλήματα.
- Ο τελευταίος βρόγχος αφορά είτε την εκτιμώμενη θερμοκρασία (hp, sp, uv & sv προβλήματα όπου συνήθως η αρχική εκτίμηση που γίνεται για τη θερμοκρασία του πρώτου σημείου είναι 3800K) είτε την καθορισμένη (tp & tv προβλήματα).

Αφού επιλυθεί το πρόβλημα ο έλεγχος επιστρέφει στο κυρίως πρόγραμμα.

Π2.5 Τομέας συμπληρωματικής επεξεργασίας των δεδομένων εισόδου

Οι υπορουτίνες των εφαρμογών που είδαμε στην προηγούμενη ενότητα καλούν τρεις υπορουτίνες σ' αυτόν τον τομέα συμπληρωματικής επεξεργασίας δεδομένων εισόδου:

- Η υπορουτίνα NEWOF συνδυάζει τις ιδιότητες του ολικού οξειδωτικού και του ολικού καυσίμου που υπολογίστηκαν στην υπορουτίνα REACT, για ένα συγκεκριμένο λόγο οξειδωτικού-καυσίμου, για να βρει τις ιδιότητες του ολικού αντιδρώντος όπως η ενθαλπία, το μοριακό βάρος κλπ.. Όπως είδαμε η NEWOF καλείται από την υπορουτίνα THERMP για κάθε λόγο οξειδωτικού-καυσίμου που ορίστηκε στην υπορουτίνα INPUT.
- Η υπορουτίνα SETEN η οποία επίσης καλείται από την υπορουτίνα THERMP και η οποία χρησιμεύει στη δημιουργία καλών αρχικών εκτιμήσεων για τη σύσταση και τη θερμοκρασία για ένα νέο σημείο με δεδομένα από ένα προηγούμενα υπολογισμένο σημείο.

- Η υπορουτίνα HCALC η οποία χρησιμεύει για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του μείγματος των αντιδρώντων για προβλήματα κυμάτων και εκρήξεων.

Π2.6 Τομέας Ισορροπίας

Ο τομέας ισορροπίας υπολογίζει συστάσεις και θερμοδυναμικές ιδιότητες για ένα συγκεκριμένο σημείο. Ελέγχεται από την υπορουτίνα EQLBRM (η οποία καλείται από τη THERMP) και η οποία με τη σειρά της καλεί τρεις υπορουτίνες CPHS, MATRIX, GAUSS και μια καταχώρηση ALLCON:

- Η υπορουτίνα CPHS υπολογίζει για ορισμένη θερμοκρασία τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του καθενός αερίου προϊόντος σύμφωνα με τις σχέσεις (3.1) – (3.3) για τη ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, την ενθαλπία και την εντροπία.

Η καταχώρηση ALLCON κάνει την ίδια εργασία με την υπορουτίνα CPHS αλλά για τα συμπυκνωμένα προϊόντα.

- Η υπορουτίνα MATRIX οργανώνει τις εξισώσεις που περιγράφουν τη χημική ισορροπία σε μια κατάλληλη μορφή προκειμένου να επιλυθούν ευκολότερα από την υπορουτίνα GAUSS.
- Η υπορουτίνα GAUSS επιλύει το σύνολο των γραμμικών επαναληπτικών εξισώσεων που δημιουργήθηκαν από την MATRIX. Επίσης καλείται από την υπορουτίνα TRANP, όπως θα δούμε παρακάτω, για να επιλύσει τις γραμμικές εξισώσεις που χρειάζονται για να υπολογισθούν οι ιδιότητες μεταφοράς θερμότητας του μείγματος των προϊόντων. Οι εξισώσεις επιλύονται χρησιμοποιώντας μια τροποποιημένη τεχνική περιστροφής για να εφαρμοστεί η απαλοιφή κατά Gauss.

Π2.7 Τομέας ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας

Ο τομέας αυτός αποτελείται από δύο υπορουτίνες, τις TRANIN και TRANP, οι οποίες χρησιμοποιούνται μόνο σε περίπτωση που έχει ζητηθεί στο αρχείο εισόδου να υπολογιστούν οι ιδιότητες μεταφοράς θερμότητας.

Η υπορουτίνα TRANIN καλείται από τη THERMP για κάθε σημείο αφού έχουν πρώτα υπολογιστεί οι θερμοδυναμικές ιδιότητες ισορροπίας του μείγματος των προϊόντων. Διαλέγει τα αέρια προϊόντα τα οποία βρίσκονται σε μεγάλη αναλογία στο καυσαέριο, διαβάζει τα δεδομένα για τα είδη αυτά από την μονάδα εισόδου/εξόδου IOSCH, υπολογίζει τυχόν δεδομένα που λείπουν και αποκλείει είδη ασήμαντα για υπολογισμούς μεταφοράς θερμότητας.

Η υπορουτίνα TRANP καλείται επίσης από τη THERMP για κάθε σημείο για να υπολογίσει τις ιδιότητες μεταφοράς μάζας του μείγματος των προϊόντων. Η επίλυση των γραμμικών εξισώσεων γίνεται με την υπορουτίνα GAUSS.

Π2.8 Τομέας αποτελεσμάτων

Ο τομέας των αποτελεσμάτων αποτελείται από τρεις υπορουτίνες, VARFMT, EFMT και OUT1 και τρεις καταχωρήσεις OUT2, OUT3 και OUT4.

Η υπορουτίνα OUT1 και οι τρεις καταχωρήσεις OUT2, OUT3 και OUT4 καλούνται από την υπορουτίνα THERMP και ο ρόλος τους είναι να τυπώνουν τα τελικά αποτελέσματα. Συγκεκριμένα η υπορουτίνα OUT1 γράφει τις ακόλουθες πληροφορίες:

- Όνομα υπόθεσης (case)
- Ονόματα και ιδιότητες αντιδρώντων
- Λόγου οξειδωτικού-καυσίμου
- Πυκνότητα των αντιδρώντων (εάν δίνονται οι τιμές στο αρχείο εισόδου)

Η καταχώρηση OUT2 τυπώνει τα τελικά αποτελέσματα των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του μείγματος των προϊόντων και αποθηκεύει κάθε ζητούμενο δεδομένο στα αρχεία γραφικής απεικόνισης (plot).

Η καταχώρηση OUT3 τυπώνει στα τελικά αποτελέσματα τα ονόματα των προϊόντων και την κατά μάζα ή γραμμομοριακή σύσταση ισορροπίας του καθενός στο μείγμα των προϊόντων. Επίσης εάν έχει ζητηθεί τυπώνονται και στα αρχεία γραφικής απεικόνισης τα ονόματα των προϊόντων μαζί με τη αναλογία τους στο καυσαέριο.

Η καταχώρηση OUT4 τυπώνει στα τελικά αποτελέσματα τις τιμές των ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας των προϊόντων της καύσης και αποθηκεύει όποια από αυτές τις ιδιότητες έχει ζητηθεί στο αρχείο γραφικής απεικόνισης.

Τα δεδομένα αποθηκεύονται στα αρχεία plot σε κάθετη κατεύθυνση σε αντίθεση με τα αρχεία των τελικών αποτελεσμάτων που είναι σε οριζόντια. Αυτό διευκολύνει την γραφική τους απεικόνιση από τα συνήθη λογισμικά (Excel, gnuplot κλπ.).

Η υπορουτίνα VARFMT (variable format) καλείται από την καταχώρηση OUT2 για να καθορίσει σύμφωνα με το μέγεθος του αριθμού, τον αριθμό των δεκαδικών ψηφίων που τυπώνονται σε μορφή F (F-format) στον πίνακα μεταβλητής μορφής Fmt.

Τέλος η υπορουτίνα EFMT (E-format) καλείται από τις καταχωρήσεις OUT2 και OUT3 για να τυπώσει μεταβλητές σε εκθετική μορφή. Χρησιμοποιείται για να τυπώσει τη πυκνότητα και τις κατά μάζα ή γραμμομοριακές συστάσεις.

Π3. Υπολογιστικοί κώδικες σε Fortran

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται οι υπολογιστικοί κώδικες σε Fortran που γράφτηκαν στα πλαίσια της διπλωματικής:

- **apoliti_enthalpia.for** ο οποίος υπολογίζει τον μοριακό τύπο του καυσίμου και με βάση τη θερμογόνο δύναμη, την απόλυτη ενθαλπία στη θερμοκρασία αναφοράς στην οποία βρίσκεται το καύσιμο πριν από την καύση
- **thermogonos_dinami.for** ο οποίος υπολογίζει τον μοριακό τύπο του καυσίμου και με βάση την απόλυτη ενθαλπία, την ανώτερη ή κατώτερη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου στη θερμοκρασία αναφοράς για την οποία έχει δοθεί η απόλυτη ενθαλπία.
- **metatroph_xml.for** με τον οποίο παράγονται οι πίνακες για τα καυσαέρια των οποίων οι ιδιότητες υπολογίζονται απαραίτητα για τους λόγους FAR = 0.00, 0.02, 0.04 & 0.06 με ακρίβεια δύο δεκαδικών ψηφίων π.χ. τα καυσαέρια που προέρχονται από τα καύσιμα Jet-A(g), Jet-A(L), JP-4, JP-5 και Diesel(g).
- **metatroph_xml_2.for** με τον οποίο παράγονται οι πίνακες των καυσαερίων που προέρχονται κυρίως από την καύση αερίων καυσίμων και για διαφορετικούς λόγους FAR από την 1^η περίπτωση. Οι λόγοι αυτοί διαβάζονται απευθείας από τα plt αρχεία με ακρίβεια τριών δεκαδικών ψηφίων π.χ. καυσαέρια από την καύση του υδρογόνου (FAR = 0.00, 0.01, 0.02 & 0.025), του μεθανίου και του τυπικού φυσικό αέριο (FAR = 0.00, 0.01, 0.02 & 0.04). Οι υπολογισμοί γίνονται απαραίτητα για τέσσερις λόγους καυσίμου-οξειδωτικού FAR ενώ πρέπει πρώτα να παραχθεί ο πίνακας για το no dissociation model για να προκύψει σωστά και ο πίνακας για το dissociation model.

Κώδικας 1: apoliti_enthalpia.for

```

program apoliti_enthalpia
implicit double precision (a-h,o-z)
character *4 ANSW
character *5 ANSW1
write(*,*) 'gnwrizoume ton moriako tupo tou kausimou??'
30 write(*,*) 'press YES or NOT'
read(*,*) ANSW
IF (ANSW.EQ.'YES') THEN
write(*,*) 'dwse ton moriako typο tou kausimou'
write(*,*) 'stin morfi CmHnSpOqNr'
write(*,*) 'dwse tous arithmous me ti seira m,n,p,q,r'
read(*,*) am,aan,p,q,r
Ac=12.0107
Ah=1.00794
As=32.065
Ao=15.9994
An=14.0067
aMf=am*Ac+aan*Ah+p*As+q*Ao+r*An
write(*,*) 'Mf=',aMf
goto 10
ELSEIF (ANSW.EQ.'NOT') THEN
c *** ipologismos moriakou tupou kausimou *****
write(*,*) 'dwse tin kata maza sustasi tou kausimou'
write(*,*) 'me tin seira antrakas,udrogono,oxygono,theio,azwto
1(KG/KGfuel)'
read(*,*) c,h,o,s,an
write(*,*) 'dwse to moriako varos tou kausimou'
read(*,*) aMf
aMc=12.0107
aMs=32.065
aMh2=2.01588
aMo2=31.9988
aMn2=28.01348
am=c*aMf/aMc
p=s*aMf/aMs
aan=h*2*aMf/aMh2
q=o*2*aMf/aMo2
r=an*2*aMf/aMn2
goto 10
ELSE
write(*,*) 'wrong answer'
goto 30
ENDIF
10 write(*,*) '*****'
write(*,*) 'o moriakos typos toy kaysimoy einai'
write(*,15) 'C',am,'H',aan,'S',p,'O',q,'N',r

```

```

15 format(5(A,F7.4,1X))
   write(*,*) '*****'
   R=8.31451 !KJ/(kg-mole)(K)
c   ***** ipologimos apolitis enthalpias kausimou *****
   write(*,*) 'dwse tin thermokrasia T se kelvin (200-1000K)'
   read(*,*) T
c   CO2
   aa1=4.943650540D+04
   aa2=-6.264116010D+02
   aa3=5.301725240D+00
   aa4=2.503813816D-03
   aa5=-2.127308728D-07
   aa6=-7.689988780D-10
   aa7=2.849677801D-13
   ba1=-4.528198460D+04
   hCO2RT=(-aa1*(T**-2))+(aa2*(T**-1)*log(T))+aa3+(aa4*T/2)+
   1(aa5*(T**2)/3)+(aa6*(T**3)/4)+(aa7*(T**4)/5)+(ba1/T)
   hCO2=hCO2RT*R*T
c   SO2
   ab1=-5.310842140D+04
   ab2=9.090311670D+02
   ab3=-2.356891244D+00
   ab4=2.204449885D-02
   ab5=-2.510781471D-05
   ab6=1.446300484D-08
   ab7=-3.369070940D-12
   bb1=-4.113752080D+04
   hSO2RT=(-ab1*(T**-2))+(ab2*(T**-1)*log(T))+ab3+(ab4*T/2)+
   1(ab5*(T**2)/3)+(ab6*(T**3)/4)+(ab7*(T**4)/5)+(bb1/T)
   hSO2=hSO2RT*R*T
c   H2O(g)
   ac1=-3.947960830D+04
   ac2=5.755731020D+02
   ac3=9.317826530D-01
   ac4=7.222712860D-03
   ac5=-7.342557370D-06
   ac6=4.955043490D-09
   ac7=-1.336933246D-12
   bc1=-3.303974310D+04
   hH2ORT=(-ac1*(T**-2))+(ac2*(T**-1)*log(T))+ac3+(ac4*T/2)+
   1(ac5*(T**2)/3)+(ac6*(T**3)/4)+(ac7*(T**4)/5)+(bc1/T)
   hH2O=hH2ORT*R*T
c   N2
   ad1=2.210371497D+04
   ad2=-3.818461820D+02
   ad3=6.082738360D+00
   ad4=-8.530914410D-03
   ad5=1.384646189D-05
   ad6=-9.625793620D-09
   ad7=2.519705809D-12

```

```

bd1=7.108460860D+02
hN2RT=(-ad1*(T**-2))+(ad2*(T**-1)*log(T))+ad3+(ad4*T/2)+
1(ad5*(T**2)/3)+(ad6*(T**3)/4)+(ad7*(T**4)/5)+(bd1/T)
hN2=hN2RT*R*T
c O2
ae1=-3.425563420D+04
ae2=4.847000970D+02
ae3=1.119010961D+00
ae4=4.293889240D-03
ae5=-6.836300520D-07
ae6=-2.023372700D-09
ae7=1.039040018D-12
be1=-3.391454870D+03
hO2RT=(-ae1*(T**-2))+(ae2*(T**-1)*log(T))+ae3+(ae4*T/2)+
1(ae5*(T**2)/3)+(ae6*(T**3)/4)+(ae7*(T**4)/5)+(be1/T)
hO2=hO2RT*R*T
c H2O(l)
af1=1.326371304D+09
af2=-2.448295388D+07
af3=1.879428776D+05
af4=-7.678995050D+02
af5=1.761556813D+00
af6=-2.151167128D-03
af7=1.092570813D-06
bf1=1.101760476D+08
hH2OLRT=(-af1*(T**-2))+(af2*(T**-1)*log(T))+af3+(af4*T/2)+
1(af5*(T**2)/3)+(af6*(T**3)/4)+(af7*(T**4)/5)+(bf1/T)
hH2OL=hH2OLRT*R*T
write(*,*) 'xeroume tin anwteri i katwteri thermogono dunami tou
1kausimou???'
100 write(*,*) 'UPPER or LOWER??'
read(*,*) ANSW1
IF (ANSW1.EQ.'LOWER') THEN
write(*,*) 'dwse tin katwteri thermogono dunamh tou kausimou se kJ/kg'
read(*,*) ALHV
ALHVm=ALHV*aMf !J/mol
write(*,*) '*****'
hCmHnSpOqNr=ALHVm+am*hCO2+(aan*hH2O/2)+p*hSO2
1+(r*hN2/2)-((am+aan/4+p-q/2)*hO2) !J/mol
write(*,20) 'hCmHnSpOqNr=',hCmHnSpOqNr,'J/mol se thermokrasia',T,
1'K'
20 format(A,F15.3,1X,A,F7.2,A)
ELSEIF (ANSW1.EQ.'UPPER') THEN
write(*,*) 'dwse tin anwteri thermogono dunamh tou kausimou
1se kJ/kg'
read(*,*) UHV
UHVm=UHV*aMf !J/mol
write(*,*) '*****'
hCmHnSpOqNr=UHVm+am*hCO2+(aan*hH2OL/2)+p*hSO2
1+(r*hN2/2)-((am+aan/4+p-q/2)*hO2) !J/mol

```



```

write(*,40) 'hCmHnSpOqNr=',hCmHnSpOqNr,'J/mol se thermokrasia',T,
1'K'
40 format(A,F15.3,1X,A,F7.2,A)
ELSE
write(*,*) 'wrong answer'
goto 100
ENDIF
end

```

Κώδικας 2: thermogonos_dinami.for

```

program thermogonos_dinami
implicit double precision (a-h,o-z)
character *4 ANSW
character *5 ANSW1
write(*,*) 'gnwrizoume ton moriako tupou tou kausimou??'
30 write(*,*) 'press YES or NOT'
read(*,*) ANSW
IF (ANSW.EQ.'YES') THEN
write(*,*) 'dwse ton moriako typo tou kausimou'
write(*,*) 'stin morfi CmHnSpOqNr'
write(*,*) 'dwse tous arithmous me ti seira m,n,p,q,r'
read(*,*) am,aan,p,q,r
Ac=12.0107
Ah=1.00794
As=32.065
Ao=15.9994
An=14.0067
aMf=am*Ac+aan*Ah+p*As+q*Ao+r*An
write(*,*) 'Mf=',aMf
goto 10
ELSEIF (ANSW.EQ.'NOT') THEN
c *** ipologismos moriakou tupou kausimou ****
write(*,*) 'dwse tin kata maza sustasi tou kausimou'
write(*,*) 'me tin seira antrakas,udrogonο,οxygonο,theio,azwto
1(KG/KGfuel)'
read(*,*) c,h,o,s,an
write(*,*) 'dwse to moriako varos tou kausimou'
read(*,*) aMf
aMc=12.0107
aMs=32.065
aMh2=2.01588
aMo2=31.9988
aMn2=28.01348
am=c*aMf/aMc
p=s*aMf/aMs

```

```

aan=h*2*aMf/aMh2
q=o*2*aMf/aMo2
r=an*2*aMf/aMn2
goto 10
ELSE
write(*,*) 'wrong answer'
goto 30
ENDIF
10 write(*,*) '*****'
write(*,*) 'o moriakos typos toy kaysimoy einai'
write(*,15) 'C',am,'H',aan,'S',p,'O',q,'N',r
15 format(5(A,F7.4,1X))
write(*,*) '*****'
R=8.31451 !KJ/(kg-mole)(K)
c ***** ipologimos thermogonou dinamis kausimou *****
write(*,*) 'dwse tin thermokrasia T se kelvin (200-1000K)'
read(*,*) T
c CO2
aa1=4.943650540D+04
aa2=-6.264116010D+02
aa3=5.301725240D+00
aa4=2.503813816D-03
aa5=-2.127308728D-07
aa6=-7.689988780D-10
aa7=2.849677801D-13
ba1=-4.528198460D+04
hCO2RT=(-aa1*(T**-2))+(aa2*(T**-1)*log(T))+aa3+(aa4*T/2)+
1(aa5*(T**2)/3)+(aa6*(T**3)/4)+(aa7*(T**4)/5)+(ba1/T)
hCO2=hCO2RT*R*T
c SO2
ab1=-5.310842140D+04
ab2=9.090311670D+02
ab3=-2.356891244D+00
ab4=2.204449885D-02
ab5=-2.510781471D-05
ab6=1.446300484D-08
ab7=-3.369070940D-12
bb1=-4.113752080D+04
hSO2RT=(-ab1*(T**-2))+(ab2*(T**-1)*log(T))+ab3+(ab4*T/2)+
1(ab5*(T**2)/3)+(ab6*(T**3)/4)+(ab7*(T**4)/5)+(bb1/T)
hSO2=hSO2RT*R*T
c H2O(g)
ac1=-3.947960830D+04
ac2=5.755731020D+02
ac3=9.317826530D-01
ac4=7.222712860D-03
ac5=-7.342557370D-06
ac6=4.955043490D-09
ac7=-1.336933246D-12
bc1=-3.303974310D+04

```

```

hH2ORT=(-ac1*(T**-2))+(ac2*(T**-1)*log(T))+ac3+(ac4*T/2)+
1(ac5*(T**2)/3)+(ac6*(T**3)/4)+(ac7*(T**4)/5)+(bc1/T)
hH2O=hH2ORT*R*T
c N2
ad1=2.210371497D+04
ad2=-3.818461820D+02
ad3=6.082738360D+00
ad4=-8.530914410D-03
ad5=1.384646189D-05
ad6=-9.625793620D-09
ad7=2.519705809D-12
bd1=7.108460860D+02
hN2RT=(-ad1*(T**-2))+(ad2*(T**-1)*log(T))+ad3+(ad4*T/2)+
1(ad5*(T**2)/3)+(ad6*(T**3)/4)+(ad7*(T**4)/5)+(bd1/T)
hN2=hN2RT*R*T
c O2
ae1=-3.425563420D+04
ae2=4.847000970D+02
ae3=1.119010961D+00
ae4=4.293889240D-03
ae5=-6.836300520D-07
ae6=-2.023372700D-09
ae7=1.039040018D-12
be1=-3.391454870D+03
hO2RT=(-ae1*(T**-2))+(ae2*(T**-1)*log(T))+ae3+(ae4*T/2)+
1(ae5*(T**2)/3)+(ae6*(T**3)/4)+(ae7*(T**4)/5)+(be1/T)
hO2=hO2RT*R*T
c H2O(l)
af1=1.326371304D+09
af2=-2.448295388D+07
af3=1.879428776D+05
af4=-7.678995050D+02
af5=1.761556813D+00
af6=-2.151167128D-03
af7=1.092570813D-06
bf1=1.101760476D+08
hH2OLRT=(-af1*(T**-2))+(af2*(T**-1)*log(T))+af3+(af4*T/2)+
1(af5*(T**2)/3)+(af6*(T**3)/4)+(af7*(T**4)/5)+(bf1/T)
hH2OL=hH2OLRT*R*T
write(*,*) 'theloume tin anwteri i katwteri thermogono dunami tou
1kausimou???'
100 write(*,*) 'UPPER or LOWER??'
read(*,*) ANSW1
write(*,*) 'dwse tin apoliti enthalpia tou kausimou se J/mol'
read(*,*) Hf
Hfm=Hf/aMf !KJ/Kg
IF (ANSW1.EQ.'LOWER') THEN
write(*,*) '*****'
Hs=am*hCO2+(aan*hH2O/2)+p*hSO2
1+(r*hN2/2)-((am+aan/4+p-q/2)*hO2)

```

```

Hsm=Hs/aMf !KJ/kg
ALHVm=Hfm-Hsm
write(*,20) 'i katwteri thermogonos dinami einai=',ALHVm,
1'KJ/kg se thermokrasia',T,'K'
20 format(A,F15.3,1X,A,F7.2,A)
ELSEIF (ANSW1.EQ.'UPPER') THEN
write(*,*) '*****'
Hs=am*hCO2+(aan*hH2OL/2)+p*hSO2
1+(r*hN2/2)-((am+aan/4+p-q/2)*hO2)
Hsm=Hs/aMf
UHVm=Hfm-Hsm
write(*,40) 'i anwteri thermogonos dinami einai=',UHVm,
1'kJ/kg se thermokrasia',T,'K'
40 format(A,F15.3,1X,A,F7.2,A)
ELSE
write(*,*) 'wrong answer'
goto 100
ENDIF
end

```

Κώδικας 3: metatroph_xml.for

```

program metatropi_xml
implicit double precision (a-h,o-z)
parameter (np=100)
character*12 ans, fuel
character*60 xml
dimension ofd(np),td(np),hd(np,np),sd(np,np),gamd(np,np),
1amwd(np,np),visd(np,np), ofw(np),tw(np),hw(np,np),sw(np,np),
1gamw(np,np),amww(np,np),visw(np,np),hdref(np,1),hwref(np,1),
1Rd(np,np),Rw(np,np),ntd(np),alntd(np)
c write(*,*) 'o kwdikas autos paragei tous xml pinakes gia kausima'
c write(*,*)'twn opoiwn oi idiotites ipologizontai gia '
c write(*,*) ' FAR= 0, 0.02, 0.04 & 0.06'
c write(*,*) 'vevawtheite oti prwta exete ston idio fakelo me ton kwdika'
c write(*,*) 'ta plt arxeia tou CEA 1-thermokrasies 200-1600K'
c write(*,*) '2-thermokrasies 1650-3000K kai'
c write(*,*) 'ref-thermokrasia anaforas gia to montelo kaushs'
c write(*,*) 'pou epitheimeite kai gia tous dio logous WAR'
write(*,*) "write the exact fuel name"
read(*,*) fuel
ncycle=1
xml="<?xml version=""1.0"" encoding=""UTF-8""
1standalone=""no""?>"
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'Calculations for Dissociation or no Dissociation Model'

```

```

write(*,*) '*****'
write(*,*) 'press 1 for NoDissociation Model'
write(*,*) 'press 2 for Dissociation Model at 50 atm'
read(*,*) NN
100 IF (NN.EQ.1) THEN
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'doing calculations for nodissociation model...'
write(*,*) '*****'
C ***** NO DISSOCIATION MODEL *****
c ***** Anagnwsh apotelesamtwon apo ta arxeia tou CEA *****
open(1,file='dry_nodiss_1.plt')
open(2,file='dry_nodiss_2.plt')
open(3,file='dry_nodiss_ref.plt')
open(4,file='wet_nodiss_1.plt')
open(5,file='wet_nodiss_2.plt')
open(6,file='wet_nodiss_ref.plt')
read(1,*)
read(4,*)
do i=1,4
do j=1,29
read(1,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1visd(i,j)
read(4,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1visw(i,j)
enddo
enddo
read(2,*)
read(5,*)
do i=1,4
do j=30,57
read(2,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1visd(i,j)
read(5,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1visw(i,j)
enddo
enddo
read(3,*)
read(6,*)
do i=1,4
read(3,*) ofd(i),hdref(i,1)
read(6,*) ofw(i),hwref(i,1)
enddo
close(1)
close(2)
close(3)
close(4)
close(5)
close(6)
c ***** Ypolosimsoi & Metatropes *****
do i=1,4

```

```

do j=1,57
alntd(j)=log(td(j))
ntd(j)=td(j)
Hd(i,j)=(hd(i,j)-hdref(i,1))*10**3 !J/kg
Hw(i,j)=(hw(i,j)-hwref(i,1))*10**3 !J/kg
Sd(i,j)=sd(i,j)*10**3 !J/kg
Sw(i,j)=sw(i,j)*10**3 !J/kg
Rd(i,j)=8314.3/amwd(i,j) !J/(kg*K)
Rw(i,j)=8314.3/amww(i,j) !J/(kg*K)
Visd(i,j)=visd(i,j)*10 !Pa*sec
Visw(i,j)=visw(i,j)*10 !Pa*sec
enddo
enddo
c ***** Eggrafi apotelesmatwn se xml morfhn*****
open(7,file='FluidModel_NoDiss.xml')
write(7,900) xml
900 format(A)
write(7,*) "<map version=""1.0"" type=""",fuel,"Fluid Model
1(No Dissociation)"" name=""Standard"" description=""",fuel,
1"Fluid Model (No dissociation)"" cdate=""11/05/2007""
1mdate="""" revision=""0.1"">"
c ***** Enthalpy *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""h_T"" description=
1""Enthalpy as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
110 format (I4,',')
enddo
write(7,111) ntd(57)
111 format(I4,"}"" />")
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""h"" description=""Specific Enthalpy
1(J/kg) """"
write(7,9) Hd(1,1),Hd(2,1),Hd(3,1),Hd(4,1)
9 format ('value="{ { { ,3(F9.1,',',1x),F9.1,',',)
do j=2,56
write(7,10) Hd(1,j),Hd(2,j),Hd(3,j),Hd(4,j)
enddo
10 format ('{ ,3(F9.1,',',1x),F9.1,',',)
write(7,11) Hd(1,57),Hd(2,57),Hd(3,57),Hd(4,57)
11 format ('{ ,3(F9.1,',',1x),F9.1,',',)

```

```

write(7,12) Hw(1,1),Hw(2,1),Hw(3,1),Hw(4,1)
12 format ('{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}',)
do j=2,56
write(7,10) Hw(1,j),Hw(2,j),Hw(3,j),Hw(4,j)
enddo
write(7,13) Hw(1,57),Hw(2,57),Hw(3,57),Hw(4,57)
13 format ('{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}}}' />')
write(7,*) "</table>"
c ***** Entropy Function *****
write(7,*) " <table type=""3D"" name=""phi_T"" description=
1""Entropy Function as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) " <interp default=""LINEAR"" valid=""{CONSTANT, LINEAR,
1SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=""{FORBIDDEN,
1CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,112) alntd(j)
112 format (F16.14,',')
enddo
write(7,113) alntd(57)
113 format(F16.14,"}"" />")
write(7,*) " <axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel
1to Air Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) " <return id=""phi"" description=""Entropy Function
1(J/(kg*K))"" "
write(7,14) Sd(1,1),Sd(2,1),Sd(3,1),Sd(4,1)
14 format ('value="{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
do j=2,56
write(7,15) Sd(1,j),Sd(2,j),Sd(3,j),Sd(4,j)
enddo
15 format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
write(7,16) Sd(1,57),Sd(2,57),Sd(3,57),Sd(4,57)
16 format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}}}' />')
write(7,17) Sw(1,1),Sw(2,1),Sw(3,1),Sw(4,1)
17 format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
do j=2,56
write(7,15) Sw(1,j),Sw(2,j),Sw(3,j),Sw(4,j)
enddo
write(7,18) Sw(1,57),Sw(2,57),Sw(3,57),Sw(4,57)
18 format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}}}' />')
write(7,*) "</table>"
c ***** Gamma *****
write(7,*) " <table type=""3D"" name=""gam_T"" description=
1""Isentropic Coefficient (gam) as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) " <interp default=""LINEAR"" valid=

```

```

1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""gam"" description=""Isentropic
1Coefficient(-)""
write(7,19) gamd(1,1),gamd(2,1),gamd(3,1),gamd(4,1)
19 format ('value="{'',3(F6.4,',',1x),F6.4,'},')
do j=2,56
write(7,20) gamd(1,j),gamd(2,j),gamd(3,j),gamd(4,j)
enddo
20 format ('{'',3(F6.4,',',1x),F6.4,'},')
write(7,21) gamd(1,57),gamd(2,57),gamd(3,57),gamd(4,57)
21 format ('{'',3(F6.4,',',1x),F6.4,'},')
write(7,22) gamw(1,1),gamw(2,1),gamw(3,1),gamw(4,1)
22 format ('{'',3(F6.4,',',1x),F6.4,'},')
do j=2,56
write(7,20) gamw(1,j),gamw(2,j),gamw(3,j),gamw(4,j)
enddo
write(7,23) gamw(1,57),gamw(2,57),gamw(3,57),gamw(4,57)
23 format ('{'',3(F6.4,',',1x),F6.4,'},') />'
write(7,*) "</table>"
c ***** Viscosity *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""mu_T"" description=
1""Dynamic Viscosity as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""mu"" description=""Dynamic Viscosity

```



```

1 (Ns/m2)""""
write(7,24) Visd(1,1),Visd(2,1),Visd(3,1),Visd(4,1)
24 format ('value=" {{ {,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',')
do j=2,56
write(7,25) Visd(1,j),Visd(2,j),Visd(3,j),Visd(4,j)
enddo
25 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',')
write(7,26) Visd(1,57),Visd(2,57),Visd(3,57),Visd(4,57)
26 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',')
write(7,27) Visw(1,1),Visw(2,1),Visw(3,1),Visw(4,1)
27 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',')
do j=2,56
write(7,25) Visw(1,j),Visw(2,j),Visw(3,j),Visw(4,j)
enddo
write(7,28) Visw(1,57),Visw(2,57),Visw(3,57),Visw(4,57)
28 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',') />'
write(7,*) "</table>"
c ***** Gas constant *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""R_FARB"" description=
1""Gas Constant as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""R"" description=""Gas Constant
1(J/(kg*K))""""
write(7,29) Rd(1,1),Rd(2,1),Rd(3,1),Rd(4,1)
29 format ('value=" {{ {,3(F7.3,',',1x),F7.3,',',')
do j=2,56
write(7,30) Rd(1,j),Rd(2,j),Rd(3,j),Rd(4,j)
enddo
30 format ('{,3(F7.3,',',1x),F7.3,',',')
write(7,31) Rd(1,57),Rd(2,57),Rd(3,57),Rd(4,57)
31 format ('{,3(F7.3,',',1x),F7.3,',',')
write(7,32) Rw(1,1),Rw(2,1),Rw(3,1),Rw(4,1)
32 format ('{,3(F7.3,',',1x),F7.3,',',')
do j=2,56
write(7,30) Rw(1,j),Rw(2,j),Rw(3,j),Rw(4,j)
enddo

```

```

write(7,33) Rw(1,57),Rw(2,57),Rw(3,57),Rw(4,57)
33 format ('{,3(F7.3,',',1x),F7.3,}') />'
write(7,*) "</table>"
write(7,*) "</map>"
close(7)
ELSEIF (NN.EQ.2) THEN
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'doing calculations for dissociation model (50atm)...'
write(*,*) '*****'
C *****DISSOCIATION MODEL*****
c ***** Anagnwsh apotelesamtwn apo ta arxeia tou CEA *****
open(1,file='dry_diss_1.plt')
open(2,file='dry_diss_2.plt')
open(3,file='dry_diss_ref.plt')
open(4,file='wet_diss_1.plt')
open(5,file='wet_diss_2.plt')
open(6,file='wet_diss_ref.plt')
read(1,*)
read(4,*)
do i=1,4
do j=1,29
read(1,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1 visd(i,j)
read(4,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1 visw(i,j)
enddo
enddo
read(2,*)
read(5,*)
do i=1,4
do j=30,57
read(2,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1 visd(i,j)
read(5,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1 visw(i,j)
enddo
enddo
read(3,*)
read(6,*)
do i=1,4
read(3,*) ofd(i),hdref(i,1)
read(6,*) ofw(i),hwref(i,1)
enddo
close(1)
close(2)
close(3)
close(4)
close(5)
close(6)
c ***** Ypolosimsoi & Metatropes *****

```

```

do i=1,4
do j=1,57
alntd(j)=log(td(j))
ntd(j)=td(j)
Hd(i,j)=(hd(i,j)-hdref(i,1))*10**3 !J/kg
Hw(i,j)=(hw(i,j)-hwref(i,1))*10**3 !J/kg
Sd(i,j)=sd(i,j)*10**3 !J/kg
Sw(i,j)=sw(i,j)*10**3 !J/kg
Rd(i,j)=8314.3/amwd(i,j) !J/(kg*K)
Rw(i,j)=8314.3/amww(i,j) !J/(kg*K)
Visd(i,j)=visd(i,j)*10 !Pa*sec
Visw(i,j)=visw(i,j)*10 !Pa*sec
enddo
enddo
c ***** Eggrafi apotelesmatwn se xml morfh*****
open(7,file='FluidModel_Diss50atm.xml')
write(7,900) xml
write(7,*) "<map version=""1.0"" type=""",fuel," Fluid Model
1With Complete Dissociation (50atm)"" name=""Dissociation50""
1 description=""",fuel,"Fluid Model With Complete
1 Dissociation (50atm)""
1 cdate=""11/05/2007"" mdate="""" revision=""0.1"">"
c ***** Enthalpy *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""h_T"" description=
1""Enthalpy as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to
1Air Ratio
1(-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""h"" description=""Specific Enthalpy
1(J/kg) """"
write(7,9) Hd(1,1),Hd(2,1),Hd(3,1),Hd(4,1)
do j=2,56
write(7,10) Hd(1,j),Hd(2,j),Hd(3,j),Hd(4,j)
enddo
write(7,11) Hd(1,57),Hd(2,57),Hd(3,57),Hd(4,57)
write(7,12) Hw(1,1),Hw(2,1),Hw(3,1),Hw(4,1)
do j=2,56
write(7,10) Hw(1,j),Hw(2,j),Hw(3,j),Hw(4,j)

```

```

        enddo
        write(7,13) Hw(1,57),Hw(2,57),Hw(3,57),Hw(4,57)
        write(7,*) "</table>"
c      ***** Entropy Function *****
        write(7,*) " <table type=""3D"" name=""phi_T"" description=
1""Entropy Function as a function of T, FARB and WAR"">"
        write(7,*) " <interp default=""LINEAR"" valid=""{CONSTANT, LINEAR,
1SPLINE}"" />"
        write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=""{FORBIDDEN,
1CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
        write(7,*) " <axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
        write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
        do j=1,56
        write(7,112) alntd(j)
        enddo
        write(7,113) alntd(57)
        write(7,*) " <axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel
1to Air Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
        write(7,*) " <return id=""phi"" description=""Entropy Function
1(J/(kg*K))"" "
        write(7,14) Sd(1,1),Sd(2,1),Sd(3,1),Sd(4,1)
        do j=2,56
        write(7,15) Sd(1,j),Sd(2,j),Sd(3,j),Sd(4,j)
        enddo
        write(7,16) Sd(1,57),Sd(2,57),Sd(3,57),Sd(4,57)
        write(7,17) Sw(1,1),Sw(2,1),Sw(3,1),Sw(4,1)
        do j=2,56
        write(7,15) Sw(1,j),Sw(2,j),Sw(3,j),Sw(4,j)
        enddo
        write(7,18) Sw(1,57),Sw(2,57),Sw(3,57),Sw(4,57)
        write(7,*) "</table>"
c      ***** Gamma *****
        write(7,*) " <table type=""3D"" name=""gam_T"" description=
1""Isentropic Coefficient (gam) as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
        write(7,*) " <interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
        write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
        write(7,*) " <axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
        write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
        do j=1,56
        write(7,110) ntd(j)
        enddo
        write(7,111) ntd(57)
        write(7,*) " <axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air

```

```

1Ratio (-)" value="{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}" />"
write(7,*) "<return id=""gam"" description=""Isentropic
1Coefficient(-)""
write(7,19) gamd(1,1),gamd(2,1),gamd(3,1),gamd(4,1)
do j=2,56
write(7,20) gamd(1,j),gamd(2,j),gamd(3,j),gamd(4,j)
enddo
write(7,21) gamd(1,57),gamd(2,57),gamd(3,57),gamd(4,57)
write(7,22) gamw(1,1),gamw(2,1),gamw(3,1),gamw(4,1)
do j=2,56
write(7,20) gamw(1,j),gamw(2,j),gamw(3,j),gamw(4,j)
enddo
write(7,23) gamw(1,57),gamw(2,57),gamw(3,57),gamw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Viscosity *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""mu_T"" description=
1""Dynamic Viscosity as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)" value="{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}" />"
write(7,*) "<return id=""mu"" description=""Dynamic Viscosity
1 (Ns/m2)""
write(7,24) Visd(1,1),Visd(2,1),Visd(3,1),Visd(4,1)
do j=2,56
write(7,25) Visd(1,j),Visd(2,j),Visd(3,j),Visd(4,j)
enddo
write(7,26) Visd(1,57),Visd(2,57),Visd(3,57),Visd(4,57)
write(7,27) Visw(1,1),Visw(2,1),Visw(3,1),Visw(4,1)
do j=2,56
write(7,25) Visw(1,j),Visw(2,j),Visw(3,j),Visw(4,j)
enddo
write(7,28) Visw(1,57),Visw(2,57),Visw(3,57),Visw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Gas constant *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""R_FARB"" description=
1""Gas Constant as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=

```

```

1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{0.00, 0.02, 0.04, 0.06}"" />"
write(7,*) "<return id=""R"" description=""Gas Constant
1(J/(kg*K))""""
write(7,29) Rd(1,1),Rd(2,1),Rd(3,1),Rd(4,1)
do j=2,56
write(7,30) Rd(1,j),Rd(2,j),Rd(3,j),Rd(4,j)
enddo
write(7,31) Rd(1,57),Rd(2,57),Rd(3,57),Rd(4,57)
write(7,32) Rw(1,1),Rw(2,1),Rw(3,1),Rw(4,1)
do j=2,56
write(7,30) Rw(1,j),Rw(2,j),Rw(3,j),Rw(4,j)
enddo
write(7,33) Rw(1,57),Rw(2,57),Rw(3,57),Rw(4,57)
write(7,*) "</table>"
write(7,*) "</map>"
close(7)
ELSE
WRITE(*,*) 'wrong answer press 1 or 2'
goto 100
ENDIF
if (ncycle.eq.2) then
write(*,*) '!!!calcuations successfully done!!!'
else
continue
endif
if (ncycle.le.1) then
550 write(*,*) 'do extra calculations for the other model???'
write(*,*) 'yes or no???'
read(*,*) ans
if (ans.eq.'yes') then
ncycle=ncycle+1
if (ncycle.gt.2) then
stop
else
if (NN.EQ.1) then
NN=2
elseif (NN.EQ.2) then
NN=1

```

```

endif
goto 100
endif
elseif (ans.eq.'no') then
write(*,*) 'calculations done'
stop
else
write(*,*) 'wrong answer press yes or no'
goto 550
endif
else
stop
endif
end

```

Κώδικας 4: metatroph_xml_2.for

```

program metatropi_xml_2
implicit double precision (a-h,o-z)
parameter (np=100)
character*12 ans, fuel
character*60 xml
dimension ofd(np),td(np),hd(np,np),sd(np,np),gamd(np,np),
1amwd(np,np),visd(np,np), ofw(np),tw(np),hw(np,np),sw(np,np),
1gamw(np,np),amww(np,np),visw(np,np),hdref(np,1),hwref(np,1),
1Rd(np,np),Rw(np,np),ntd(np),alntd(np),far(np)
c write(*,*) 'o kwdikas autos paragei tous xml pinakes gia kausima'
c write(*,*) 'twon opoiwn oi idiotites ipologizontai gia '
c write(*,*) 'diaforous logous FAR pou kathorizontai apo ta plt arxeia'
c write(*,*) 'me akriveia triwn dekadikwn psifiwn'
c write(*,*) 'vevawtheite oti prwta exete ston idio fakelo me ton kwdika'
c write(*,*) 'ta plt arxeia tou CEA 1-thermokrasies 200-1600K'
c write(*,*) '2-thermokrasies 1650-3000K kai'
c write(*,*) 'ref-thermokrasia anaforas gia to montelo kaushs'
c write(*,*) 'pou epitheimeite kai gia tous dio logous WAR'
write(*,*) "write the exact fuel type"
read(*,*) fuel
ncycle=1
xml="<?xml version=""1.0"" encoding=""UTF-8""
1standalone=""no""?>"
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'Calculations for Dissociation or no Dissociation Model'
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'press 1 for NoDissociation Model'
write(*,*) 'press 2 for Dissociation Model at 50 atm'

```

```

      read(*,*) NN
100 IF (NN.EQ.1) THEN
      write(*,*) '*****'
      write(*,*) 'doing calculations for nodissociation model...'
      write(*,*) '*****'
C     **** NO DISSOCIATION MODEL ****
c     ***** Anagnwsh apotelesamtwn apo ta arxeia tou CEA *****
      open(1,file='dry_nodiss_1.plt')
      open(2,file='dry_nodiss_2.plt')
      open(3,file='dry_nodiss_ref.plt')
      open(4,file='wet_nodiss_1.plt')
      open(5,file='wet_nodiss_2.plt')
      open(6,file='wet_nodiss_ref.plt')
      read(1,*)
      read(4,*)
      do i=1,4
      do j=1,29
      read(1,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
      1visd(i,j)
      read(4,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
      1visw(i,j)
      enddo
      enddo
      read(2,*)
      read(5,*)
      do i=1,4
      do j=30,57
      read(2,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
      1visd(i,j)
      read(5,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
      1visw(i,j)
      enddo
      enddo
      read(3,*)
      read(6,*)
      do i=1,4
      read(3,*) ofd(i),hdref(i,1)
      read(6,*) ofw(i),hwref(i,1)
      far(i)=1/ofd(i)
      enddo
      close(1)
      close(2)
      close(3)
      close(4)
      close(5)
      close(6)
c     ***** Ypolosimsoi & Metatropes *****
      do i=1,4
      do j=1,57
      alntd(j)=log(td(j))

```



```

ntd(j)=td(j)
Hd(i,j)=(hd(i,j)-hdref(i,1))*10**3 !J/kg
Hw(i,j)=(hw(i,j)-hwref(i,1))*10**3 !J/kg
Sd(i,j)=sd(i,j)*10**3 !J/kg
Sw(i,j)=sw(i,j)*10**3 !J/kg
Rd(i,j)=8314.3/amwd(i,j) !J/(kg*K)
Rw(i,j)=8314.3/amww(i,j) !J/(kg*K)
Visd(i,j)=visd(i,j)*10 !Pa*sec
Visw(i,j)=visw(i,j)*10 !Pa*sec
enddo
enddo
c ***** Eggrafi apotelesmatwn se xml morf*****
open(7,file='FluidModel_NoDiss.xml')
write(7,900) xml
900 format(A)
write(7,*) "<map version=""1.0"" type=""",fuel,"Fluid Model
1(No Dissociation)"" name=""Standard"" description=""",fuel,
1"Fluid Model (No dissociation)"" cdate=""11/05/2007""
1mdate="""" revision=""0.1"">"
c ***** Enthalpy *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""h_T"" description=
1""Enthalpy as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
110 format (I4,',')
enddo
write(7,111) ntd(57)
111 format(I4,"}"" />")
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
450 format(F5.3,',')
enddo
write(7,451) far(4)
451 format(F5.3,"}"" />")
write(7,*) "<return id=""h"" description=""Specific Enthalpy
1(J/kg) """"
write(7,9) Hd(1,1),Hd(2,1),Hd(3,1),Hd(4,1)
9 format ('value="{{ {3(F9.1,',',1x),F9.1,'},')
do j=2,56
write(7,10) Hd(1,j),Hd(2,j),Hd(3,j),Hd(4,j)

```

```

    enddo
10  format ('{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}',)
    write(7,11) Hd(1,57),Hd(2,57),Hd(3,57),Hd(4,57)
11  format ('{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}',)
    write(7,12) Hw(1,1),Hw(2,1),Hw(3,1),Hw(4,1)
12  format ('{{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}',)
    do j=2,56
        write(7,10) Hw(1,j),Hw(2,j),Hw(3,j),Hw(4,j)
    enddo
    write(7,13) Hw(1,57),Hw(2,57),Hw(3,57),Hw(4,57)
13  format ('{,3(F9.1,',',1x),F9.1,}'>')
    write(7,*) "</table>"
c   ***** Entropy Function *****
    write(7,*) " <table type=""3D"" name=""phi_T"" description=
1""Entropy Function as a function of T, FARB and WAR)"">"
    write(7,*) " <interp default=""LINEAR"" valid=""{CONSTANT, LINEAR,
1SPLINE}"" />"
    write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=""{FORBIDDEN,
1CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
    write(7,*) " <axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
    write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
    do j=1,56
        write(7,112) alntd(j)
112 format (F16.14,',')
    enddo
    write(7,113) alntd(57)
113 format(F16.14,"}"" />")
    write(7,*) " <axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
    do i=1,3
        write(7,450) far(i)
    enddo
    write(7,451) far(4)
    write(7,*) " <return id=""phi"" description=""Entropy Function
1(J/(kg*K))"" "
    write(7,14) Sd(1,1),Sd(2,1),Sd(3,1),Sd(4,1)
14  format ('value="{{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
    do j=2,56
        write(7,15) Sd(1,j),Sd(2,j),Sd(3,j),Sd(4,j)
    enddo
15  format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
    write(7,16) Sd(1,57),Sd(2,57),Sd(3,57),Sd(4,57)
16  format ('{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
    write(7,17) Sw(1,1),Sw(2,1),Sw(3,1),Sw(4,1)
17  format ('{{,3(F7.1,',',1x),F7.1,}',)
    do j=2,56
        write(7,15) Sw(1,j),Sw(2,j),Sw(3,j),Sw(4,j)
    enddo

```

```

write(7,18) Sw(1,57),Sw(2,57),Sw(3,57),Sw(4,57)
18 format ('{,3(F7.1,',,1x),F7.1,}') />)
write(7,*) "</table>"
c ***** Gamma *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""gam_T"" description=
1""Isentropic Coefficient (gam) as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""gam"" description=""Isentropic
1Coefficient(-)""
write(7,19) gamd(1,1),gamd(2,1),gamd(3,1),gamd(4,1)
19 format ('value=" { { ,3(F6.4,',,1x),F6.4,}',)
do j=2,56
write(7,20) gamd(1,j),gamd(2,j),gamd(3,j),gamd(4,j)
enddo
20 format ('{,3(F6.4,',,1x),F6.4,}',)
write(7,21) gamd(1,57),gamd(2,57),gamd(3,57),gamd(4,57)
21 format ('{,3(F6.4,',,1x),F6.4,}',)
write(7,22) gamw(1,1),gamw(2,1),gamw(3,1),gamw(4,1)
22 format ('{ { ,3(F6.4,',,1x),F6.4,}',)
do j=2,56
write(7,20) gamw(1,j),gamw(2,j),gamw(3,j),gamw(4,j)
enddo
write(7,23) gamw(1,57),gamw(2,57),gamw(3,57),gamw(4,57)
23 format ('{,3(F6.4,',,1x),F6.4,}') />)
write(7,*) "</table>"
c ***** Viscosity *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""mu_T"" description=
1""Dynamic Viscosity as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=

```

```

1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""mu"" description=""Dynamic Viscosity
1 (Ns/m2)""""
write(7,24) Visd(1,1),Visd(2,1),Visd(3,1),Visd(4,1)
24 format ('value=" {{ {,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',)
do j=2,56
write(7,25) Visd(1,j),Visd(2,j),Visd(3,j),Visd(4,j)
enddo
25 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',)
write(7,26) Visd(1,57),Visd(2,57),Visd(3,57),Visd(4,57)
26 format ('{,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',)
write(7,27) Visw(1,1),Visw(2,1),Visw(3,1),Visw(4,1)
27 format ('{{ {,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',)
do j=2,56
write(7,25) Visw(1,j),Visw(2,j),Visw(3,j),Visw(4,j)
enddo
write(7,28) Visw(1,57),Visw(2,57),Visw(3,57),Visw(4,57)
28 format ('{{ {,3(F5.3,'E-05',',',1x),F5.3,'E-05',',',) />')
write(7,*) "</table>"
c ***** Gas constant *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""R_FARB"" description=
1""Gas Constant as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) " <extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) " <axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air

```

```

1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""R"" description=""Gas Constant
1(J/(kg*K))""""
write(7,29) Rd(1,1),Rd(2,1),Rd(3,1),Rd(4,1)
29 format ('value="{ { {,3(F7.3,',,1x),F7.3,}',)
do j=2,56
write(7,30) Rd(1,j),Rd(2,j),Rd(3,j),Rd(4,j)
enddo
30 format ('{,3(F7.3,',,1x),F7.3,}',)
write(7,31) Rd(1,57),Rd(2,57),Rd(3,57),Rd(4,57)
31 format ('{,3(F7.3,',,1x),F7.3,}',)
write(7,32) Rw(1,1),Rw(2,1),Rw(3,1),Rw(4,1)
32 format ('{ { {,3(F7.3,',,1x),F7.3,}',)
do j=2,56
write(7,30) Rw(1,j),Rw(2,j),Rw(3,j),Rw(4,j)
enddo
write(7,33) Rw(1,57),Rw(2,57),Rw(3,57),Rw(4,57)
33 format ('{,3(F7.3,',,1x),F7.3,}' }" />')
write(7,*) "</table>"
write(7,*) "</map>"
close(7)
ELSEIF (NN.EQ.2) THEN
write(*,*) '*****'
write(*,*) 'doing calculations for dissociation model (50atm)...'
write(*,*) '*****'
C *****DISSOCIATION MODEL*****
c ***** Anagnwsh apotelesamtwn apo ta arxeia tou CEA *****
open(1,file='dry_diss_1.plt')
open(2,file='dry_diss_2.plt')
open(3,file='dry_diss_ref.plt')
open(4,file='wet_diss_1.plt')
open(5,file='wet_diss_2.plt')
open(6,file='wet_diss_ref.plt')
read(1,*)
read(4,*)
do i=1,4
do j=1,29
read(1,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1visd(i,j)
read(4,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1visw(i,j)
enddo
enddo
read(2,*)
read(5,*)
do i=1,4

```

```

do j=30,57
read(2,*) ofd(i),td(j),hd(i,j),sd(i,j),gamd(i,j),amwd(i,j),
1 visd(i,j)
read(5,*) ofw(i),tw(j),hw(i,j),sw(i,j),gamw(i,j),amww(i,j),
1 visw(i,j)
enddo
enddo
read(3,*)
read(6,*)
do i=1,4
read(3,*) ofd(i),hdref(i,1)
read(6,*) ofw(i),hwref(i,1)
enddo
close(1)
close(2)
close(3)
close(4)
close(5)
close(6)
c ***** Υπολοισμοι & Μετατροπες *****
do i=1,4
do j=1,57
alntd(j)=log(td(j))
ntd(j)=td(j)
Hd(i,j)=(hd(i,j)-hdref(i,1))*10**3 !J/kg
Hw(i,j)=(hw(i,j)-hwref(i,1))*10**3 !J/kg
Sd(i,j)=sd(i,j)*10**3 !J/kg
Sw(i,j)=sw(i,j)*10**3 !J/kg
Rd(i,j)=8314.3/amwd(i,j) !J/(kg*K)
Rw(i,j)=8314.3/amww(i,j) !J/(kg*K)
Visd(i,j)=visd(i,j)*10 !Pa*sec
Visw(i,j)=visw(i,j)*10 !Pa*sec
enddo
enddo
c ***** Eggrafi apotelesmatwn se xml morf*****
open(7,file='FluidModel_Diss50atm.xml')
write(7,900) xml
write(7,*) "<map version=""1.0"" type=""",fuel," Fluid Model
1With Complete Dissociation (50atm)"" name=""Dissociation50""
1 description =""",fuel,"Fluid Model With Complete
1 Dissociation (50atm)""
1 cdate=""11/05/2007"" mdate="""" revision=""0.1"">"
c ***** Enthalpy *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""h_T"" description=
1""Enthalpy as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""

```

```

1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""h"" description=""Specific Enthalpy
1(J/kg) """"
write(7,9) Hd(1,1),Hd(2,1),Hd(3,1),Hd(4,1)
do j=2,56
write(7,10) Hd(1,j),Hd(2,j),Hd(3,j),Hd(4,j)
enddo
write(7,11) Hd(1,57),Hd(2,57),Hd(3,57),Hd(4,57)
write(7,12) Hw(1,1),Hw(2,1),Hw(3,1),Hw(4,1)
do j=2,56
write(7,10) Hw(1,j),Hw(2,j),Hw(3,j),Hw(4,j)
enddo
write(7,13) Hw(1,57),Hw(2,57),Hw(3,57),Hw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Entropy Function *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""phi_T"" description=
1""Entropy Function as a function of T, FARB and WAR)"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=""{CONSTANT, LINEAR,
1SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=""{FORBIDDEN,
1CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,112) alntd(j)
enddo
write(7,113) alntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""phi"" description=""Entropy Function
1(J/(kg*K))"" "
write(7,14) Sd(1,1),Sd(2,1),Sd(3,1),Sd(4,1)

```

```

do j=2,56
write(7,15) Sd(1,j),Sd(2,j),Sd(3,j),Sd(4,j)
enddo
write(7,16) Sd(1,57),Sd(2,57),Sd(3,57),Sd(4,57)
write(7,17) Sw(1,1),Sw(2,1),Sw(3,1),Sw(4,1)
do j=2,56
write(7,15) Sw(1,j),Sw(2,j),Sw(3,j),Sw(4,j)
enddo
write(7,18) Sw(1,57),Sw(2,57),Sw(3,57),Sw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Gamma *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""gam_T"" description=
1""Isentropic Coefficient (gam) as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""gam"" description=""Isentropic
1Coefficient(-)""
write(7,19) gamd(1,1),gamd(2,1),gamd(3,1),gamd(4,1)
do j=2,56
write(7,20) gamd(1,j),gamd(2,j),gamd(3,j),gamd(4,j)
enddo
write(7,21) gamd(1,57),gamd(2,57),gamd(3,57),gamd(4,57)
write(7,22) gamw(1,1),gamw(2,1),gamw(3,1),gamw(4,1)
do j=2,56
write(7,20) gamw(1,j),gamw(2,j),gamw(3,j),gamw(4,j)
enddo
write(7,23) gamw(1,57),gamw(2,57),gamw(3,57),gamw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Viscosity *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""mu_T"" description=
1""Dynamic Viscosity as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=

```



```

1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)
enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""mu"" description=""Dynamic Viscosity
1 (Ns/m2)""""
write(7,24) Visd(1,1),Visd(2,1),Visd(3,1),Visd(4,1)
do j=2,56
write(7,25) Visd(1,j),Visd(2,j),Visd(3,j),Visd(4,j)
enddo
write(7,26) Visd(1,57),Visd(2,57),Visd(3,57),Visd(4,57)
write(7,27) Visw(1,1),Visw(2,1),Visw(3,1),Visw(4,1)
do j=2,56
write(7,25) Visw(1,j),Visw(2,j),Visw(3,j),Visw(4,j)
enddo
write(7,28) Visw(1,57),Visw(2,57),Visw(3,57),Visw(4,57)
write(7,*) "</table>"
c ***** Gas constant *****
write(7,*) "<table type=""3D"" name=""R_FARB"" description=
1""Gas Constant as a function of T, FARB and WAR)
1"">"
write(7,*) "<interp default=""LINEAR"" valid=
1""{CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<extrap default=""CONSTANT"" valid=
1""{FORBIDDEN, CONSTANT, LINEAR, SPLINE}"" />"
write(7,*) "<axis1 id=""WAR"" description=""Water to Air Ratio (-)""
1value=""{0.00, 0.10}"" />"
write(7,*) "<axis2 id=""T"" description=""Temperature(K)""
1value=""{"
do j=1,56
write(7,110) ntd(j)
enddo
write(7,111) ntd(57)
write(7,*) "<axis3 id=""FARB"" description=""Burnt Fuel to Air
1Ratio (-)"" value=""{"
do i=1,3
write(7,450) far(i)

```

```

enddo
write(7,451) far(4)
write(7,*) "<return id=""R"" description=""Gas Constant
1(J/(kg*K))""""
write(7,29) Rd(1,1),Rd(2,1),Rd(3,1),Rd(4,1)
do j=2,56
write(7,30) Rd(1,j),Rd(2,j),Rd(3,j),Rd(4,j)
enddo
write(7,31) Rd(1,57),Rd(2,57),Rd(3,57),Rd(4,57)
write(7,32) Rw(1,1),Rw(2,1),Rw(3,1),Rw(4,1)
do j=2,56
write(7,30) Rw(1,j),Rw(2,j),Rw(3,j),Rw(4,j)
enddo
write(7,33) Rw(1,57),Rw(2,57),Rw(3,57),Rw(4,57)
write(7,*) "</table>"
write(7,*) "</map>"
close(7)
ELSE
WRITE(*,*) 'wrong answer press 1 or 2'
goto 100
ENDIF
if (ncycle.eq.2) then
write(*,*) '!!!calculations successfully done!!!'
else
continue
endif
if (ncycle.le.1) then
550 write(*,*) 'do extra calculations for the other model???'
write(*,*) 'yes or no???'
read(*,*) ans
if (ans.eq.'yes') then
ncycle=ncycle+1
if (ncycle.gt.2) then
stop
else
if (NN.EQ.1) then
NN=2
elseif (NN.EQ.2) then
NN=1
endif
goto 100
endif
elseif (ans.eq.'no') then
write(*,*) 'calculations done'
stop
else
write(*,*) 'wrong answer press yes or no'
goto 550
endif
else

```

```
stop  
endif  
end
```