

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΒΕΛΤΙΩΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΕΡΓΑΖΟΜΕΝΟΥ ΜΕΣΟΥ ΑΕΡΙΟΣΤΡΟΒΙΛΟΥ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ ΣΕ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΣΤΡΑΦΟΥΣ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΘΕΟΔΩΡΟΣ ΠΑΪΤΑΖΟΓΛΟΥ

Επίβλεψη: Λέκτορας Ν. Αρετάκης

ΑΘΗΝΑ ΙΟΥΛΙΟΣ 2012

προλογος

Από τη θέση αυτή θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους έχουν συμβάλλει στην εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Θα ήθελα να ευχαριστήσω τους κυρίους Αρετάκη, Τσαλαβούτα, Αλεξίου και Καλαθάκη για τις πολύτιμες συμβουλές και υποδείξεις τους.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω από τα βάθη της καρδιάς μου την οικογένεια μου για την αμέριστη συμπαράσταση και τη ψυχολογική υποστήριξη που μου προσέφερε και για τις αμέτρητες θυσίες που έχει κάνει για μένα.

Θεόδωρος Παϊταζόγλου Ιούλιος 2012

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1	1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ1.					
1.1	N	Ιοντελοποίηση της καύσης	1.2			
1.	.1.1	Πλήρης Καύση	1.3			
1.1.2		Χημική ισορροπία	1.4			
1.1.3		Χημική Κινητική	1.5			
1.2	Λ	ιογισμικά μοντελοποίησης της καύσης	1.6			
1.	.2.1	NASA CEA (Chemical Equilibrium with Applications)	1.6			
1.	.2.2	Gaseq	1.6			
1.	.2.3	Access to TPEQUIL, HPFLAME and UVFLAME Software	1.6			
1.2.4		CHEMKIN II	1.7			
1.	.2.5	Cantera	1.7			
1.3	E	μπορικά προγράμματα Προσομοίωσης λειτουργίας Αεριοστρο	οβίλων 1. 8			
1.	.3.1	PROOSIS (Propulsion Object Oriented Simulation Software)	1.8			
1.	.3.2	Gas-Turb	1.8			
1.3.3		GSP				
1.	.3.4	NPSS	1.9			
1.4	Σ	πόχοι και δομή παρούσας Διπλωματικής εργασίας	1.9			
2	Περ	οιγραφή NASA CEA	2.1			
2.1	X		2.1			
2.	.1.1	Η Χημική ισορροπία στο CEA	2.2			
2.2	Δ	ομή CEA	2.4			
2.	.2.1	Οι βιβλιοθήκες trans.lib και thermo.lib	2.5			
2.	.2.2	Πηγαίος κώδικας cea2.for	2.9			
2.	.2.3	Υπορουτίνες CEA	2.9			
2.	.2.4	Γραφικό περιβάλλον-Καρτέλες	2.17			
2.3	A	νάπτυξη βιβλιοθήκης υπολογισμού χημικής ισορροπίας	2.22			
2.4	E	πιβεβαίωση του νέου κώδικα	2.29			
2.5	Σύνοψη-Συμπεράσματα2.32					
3	Εισ	αγωγή του NASA CEA στο PROOSIS	3.1			

i

3.1	Σ	ζόντομη περιγραφή PROOSIS	3.1
3.1	1.1	Χαρακτηριστικά PROOSIS	3.2
3.2	N	Ιοντέλα Εοναζόμενου Μέσου	
3.2	2.1	Δημιουονία και επεξεονασία μοντέλων εοναζόμενου μέσου	
012			
3.3	ł	Ι συνιστώσα Burner	3.6
3.4	A	ντικατάσταση του μοντέλου εργαζόμενου μέσου	3.13
3.4	4.1	Τροποποίηση κώδικα Fortran	3.13
3.4	1.2	Σύγκριση αποτελεσμάτων κώδικα με τους πίνακες xml	3.14
3.4	4.3	Δημιουργία βιβλιοθήκης και αλλαγή μοντέλου εργαζόμενου μέσου	3.15
3.4	1.4	Αντικατάσταση του υπάρχοντος μοντέλου εργαζόμενου μέσου	3.15
3.4	4.5	Μοντελοποίηση Θαλάμου Καύσης	3.17
3.5	Х	ζρόνοι εκτέλεσης πειράματος	3.19
3.6	Σ	ζόνοψη-Συμπεράσματα	3.19
4	E/A	αρμονές νέου θαλέμου καύσης	4 4
4	⊑ψ	αρμογες νέου θαλάμου καυστις	4. I
4.1	ł	Ι νέα συνιστώσα θαλάμου καύσης	4.1
4.2	Ι	Ιροσομοίωση συνιστώσας θαλάμου καύσης	4.1
4.3	Ι	Ιροσομοίωση συνιστώσας μηχανής Turbojet	4.3
4.4	Σ	ζύνοψη-Συμπεράσματα	4.7
5	Evo	αλλακτικά καύσιμα για αεροπορικούς κινητήρες	5.1
5.1	ł	Ι αναγκαιότητα για ανάπτυξη εναλλακτικών καυσίμων	5.1
5.2	k \ 1	Δριτηρια καταλληλοτητας καυσίμων	5.3
5.2	2.1	Aριθμος Wobbe (Wobbe index)	
5.2	2.2	Εμβελεια αεροσκαφους	5.6
5.3	F	ζίδη εναλλακτικών καυσίμων	5.7
5.3	3.1	Βιοντήζελ (Biodiesel)	5.8
5.3	3.2	Μεθανόλη	5.9
5.3	3.3	Αιθανόλη	5.9
5.3	3.4	Υδρογόνο	5.9
5.3	3.5	Πυρηνική ενέργεια	5.10

5.4	.4 Μέθοδοι FT(Fischer-Tropsch) και HRJ (Hydroprocessed Renewable Jet)						
	5.	.11					
5.4.1 Χημική δ		Χημική διαδικασία5	.11				
5.4.2		Συνθήκες	.12				
5.4.3		Κατανομή προϊόντων5	.12				
5.4.4		Σύγκριση συνθετικού και συμβατικού καυσίμου5.	.13				
5.4.5		Hydrotreated Renewable Jet (HRJ)	.13				
5.5	П	Ιυκνότητα5.	.14				
5.6	Σ	ώνοψη-Συμπεράσματα5.	.15				
6	Avo	ακεφαλαίωση-Συμπεράσματα-Προτάσεις	6.1				
6.1	Συμπεράσματα6.2						
6.2	5.2 Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη6.3						
7	7 Βιβλιογραφία7.1						
ΠAF	PAP	ТНМАТА	1				
П1.	Y	πορουτίνα CEAPRO	1				
П2.	В	βιβλιοθήκη CEA_funcsfluid	1				

1 εισαγωγγ

Οι μεταφορές καταναλώνουν περίπου το 20% της ενέργεια παγκοσμίως και παράγουν το 23% του διοξειδίου του άνθρακα που οφείλεται σε αυτή την ενέργεια [1]. Βάσει των τωρινών τάσεων οι εκπομπές διοξειδίου του άνθρακα αναμένεται να αυξηθούν κατά 50% μέχρι το 2030 και πάνω από 80% το 2050.

Αυτές οι προβλέψεις είναι ανησυχητικές για την περαιτέρω επιβάρυνση του περιβάλλοντος. Η διακρατική επιτροπή για την κλιματική αλλαγή (IPCC) εκτιμά ότι για να αποφευχθούν οι χειρότερες συνέπειες της κλιματικής αλλαγής πρέπει οι εκπομπές διοξειδίου του άνθρακα να μειωθούν κατά 50% μέχρι το 2050. Για να επιτευχθεί αυτό ο τομέας των μεταφορών θα έχει να διαδραματίσει σημαντικότατο ρόλο.

Η αεροπλοΐα είναι το ταχύτερα αναπτυσσόμενο μεταφορικό μέσο και αυτή η τάση προβλέπεται να συνεχιστεί και στο μέλλον. Η αεροπλοΐα καταναλώνει περίπου 11% της συνολικής ενέργεια που καταναλώνεται σε όλα τα μεταφορικά μέσα. Το 2050 αναμένεται να τριπλασιαστεί, φτάνοντας περίπου το 19% εφόσον οι ίδιες τάσεις παραμείνουν. Όσον αφορά στις εκπομπές καυσαερίων ευθύνεται για περίπου το 12% των εκπομπών διοξειδίου του άνθρακα των μεταφορών και 3% του ανθρωπογενούς CO₂ [1].

Ο τομέας των μεταφορών εξαρτάται παγκοσμίως σχεδόν αποκλειστικά (πάνω από 95%) από την καύση ορυκτών καυσίμων. Αυτό σημαίνει ότι η καύση των ορυκτών καυσίμων θα συνεχίσει να διαδραματίζει κυρίαρχο ρόλο στον τομέα αυτό, τουλάχιστον σε βραχυπρόθεσμο στάδιο. Εναλλακτικοί τρόποι πρόωσης του αεροσκάφους, όπως η ηλεκτροκίνηση, βρίσκονται ακόμα σε πειραματικό στάδιο και υστερούν σε σχέση με τους στροβιλοαντιδραστήρες ακόμα και με τις μηχανές εσωτερικής καύσης τόσο από άποψη ταχύτητας όσο και εμβέλειας.

Η αντιμετώπιση αυτών των προκλήσεων έγκειται στον περιορισμό της κατανάλωσης ενέργειας και τη μείωση των ρύπων. Για την επίτευξη των παραπάνω απαιτείται καταρχήν η κατανόηση της διαδικασίας της καύσης και η κατάλληλη αναπαράσταση της σε υπολογιστικό επίπεδο ή πειραματική μελέτη.

Η πειραματική μελέτη της λειτουργίας αεριοστροβίλων είναι ιδιαίτερα δαπανηρή και σε μερικές περιπτώσεις ανέφικτη για το χρήστη [2] όπως π.χ. όταν χρειάζονται μετρήσεις μεγεθών που απαιτούν όργανα επιπλέον των τυποποιημένων που συνοδεύουν έναν κινητήρα. Έτσι είναι επιθυμητή η υπολογιστική μοντελοποίηση της λειτουργίας τους.

Το υπολογιστικό μοντέλο μιας μηχανής μπορεί να χρησιμοποιηθεί με πολλούς και διαφόρους τρόπους. Η σχεδίαση ή η μετατροπή ενός κινητήρα μπορεί να μελετηθεί σε πρώτη φάση μέσω του υπολογιστικού μοντέλου. Μια άλλη εφαρμογή, σημαντική για το χρήστη, είναι ο υπολογισμός στοιχείων που είναι απαραίτητα για την παρακολούθηση λειτουργίας (Engine Monitoring). Τέτοια στοιχεία είναι οι τιμές αναφοράς θερμοδυναμικών μεγεθών, η ευαισθησία παραμέτρων σε μεταβολές μετρούμενων ποσοτήτων, ενώ μπορούν να προσομοιωθούν οι επιδράσεις συγκεκριμένων τύπων βλάβης. Στην επόμενη ενότητα θα παρουσιαστούν υπολογιστικά μοντέλα προσομοίωσης της καύσης και λειτουργίας αεριοστροβίλων.

1.1 Μοντελοποίηση της καύσης

Η ακρίβεια ενός υπολογιστικού μοντέλου εξαρτάται από την ακρίβεια μοντελοποίησης επιμέρους διεργασιών. Μια από αυτές είναι η οξείδωση του χρησιμοποιούμενου καυσίμου. Στην ενότητα αυτή θα περιγραφούν συνοπτικά τα χαρακτηριστικά ενός προγράμματος μοντελοποίησης της καύσης και θα κατηγοριοποιηθούν ανάλογα με τον τρόπο προσέγγισης της καύσης.

Σε όλα τα προγράμματα μοντελοποίησης της καύσης ανεξαρτήτως της μεθόδου που χρησιμοποιούν, εργαζόμενο μέσο θεωρείται:

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

Επομένως συμπεραίνεται ότι ένα υπολογιστικό μοντέλο εργαζόμενου μέσου πρέπει να λαμβάνει υπόψη τις θερμοδυναμικές ιδιότητες και των δύο παραπάνω ρευστών. Η καύση διέπεται από σύνθετα φαινόμενα και αποτελεί βασικότατη διεργασία μίας θερμικής μηχανής οπότε η μοντελοποίηση των καυσαερίων είναι πρωταρχικής σημασίας για την ακρίβεια της εκάστοτε μεθόδου. Επιπλέον το εργαζόμενο μέσο έχει σύσταση που μεταβάλλεται συνεχώς κατά μήκος της μηχανής.

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 αεροστροβίλων.
- Στην δυνατότητα μελέτης της καύσης εναλλακτικών καυσίμων (βιοκαύσιμα, φυσικό αέριο, υδρογόνο κλπ.).
- Τέλος μπορεί να μελετηθεί πιο διεξοδικά η 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.

1.1.1 Πλήρης Καύση

Το εργαζόμενο μέσο θεωρείται ομογενές μείγμα δυο τέλειων αερίων, αέρα και καυσαερίου. Η σύσταση του αέρα υπολογίζεται βάσει των ατμοσφαιρικών συνθηκών ενώ η σύσταση του καυσαερίου προσδιορίζεται από τη στοιχειομετρική καύση καυσίμου συγκεκριμένης σύστασης. Στη γενική περίπτωση που είναι γνωστός ο μοριακός τύπος του καυσίμου $C_m H_n S_p O_q N_r$ όπου m,n,p,q,r είναι φυσικοί αριθμοί η χημική αντίδραση καύσης είναι :

$$C_m H_n S_p O_q N_r + \left(m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2}\right) O_2 \rightarrow m C O_2 + \frac{n}{2} H_2 O + p S O_2 + \frac{r}{2} N_2$$
 (1.1)

Βασίζεται δηλαδή στην υπόθεση της σταθερής σύστασης του εργαζόμενου μέσου ανεξάρτητα από τη θερμοκρασία (no dissociation model). 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 θείου και αζώτου)
- Ο₂ εάν η καύση είναι φτωχή (λ>1) ή και Ar και N₂ εάν ο αέρας που οξειδώνει το καύσιμο περιέχει αργόν και άζωτο επιπλέον του οξυγόνου

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.

1.1.2 <u>Χημική ισορροπία</u>

Περισσότερο ακριβής μοντελοποίηση της καύσης γίνεται με τη χημική ισορροπία (μοντέλο μηδενικής διάστασης) η οποία παρέχει τη δυνατότητα να ληφθεί υπόψη η χημική διάσταση των προϊόντων οξείδωσης των καυσίμων. Σε υψηλές θερμοκρασίες τα προϊόντα της καύσης δεν είναι αυτά που προκύπτουν από την εξίσωση (1.1) και τα κυρίως στοιχεία διίστανται. Η διάσταση αυτών και οι αντιδράσεις μεταξύ τους παράγουν τα ακόλουθα: H₂,OH,CO,H,O,N,NO και άλλα. Το πρόβλημα που επιλύει η χημική ισορροπία είναι ο υπολογισμός της σύστασης των προϊόντων της καύσης σε δεδομένη θερμοκρασία και πίεση υπό τον περιορισμό ότι διατηρείται ο αριθμός mole κάθε στοιχείου.

Στην πραγματικότητα κατά την καύση ενός καυσίμου ΔΕΝ συμβαίνει η απλοϊκή αντίδραση που διατυπώθηκε προηγουμένως (1.1) αλλά μια σειρά από πολύπλοκες χημικές αντιδράσεις μία από τις οποίες π.χ. είναι και η:

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \to CO_2 \tag{1.2}$$

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 CO₂ διίστανται (dissociation) σε μόρια CO και O₂, αντίδραση η οποία συνοδεύεται από απορρόφηση ενέργειας και έτσι τελικά μειώνεται η θερμοκρασία της καύσης. Δηλαδή στην πραγματικότητα λαμβάνει χώρα η αντίδραση:

$$CO_2 \leftrightarrow CO + \frac{1}{2}O_2$$
 (1.3)

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

$$CO_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO$$
 (1.4)

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow H_2O \tag{1.5}$$

$$OH + \frac{1}{2}H_2 \leftrightarrow H_2O \tag{1.6}$$

$$\frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow O \tag{1.7}$$

$$\frac{1}{2}H_2 \leftrightarrow H \tag{1.8}$$

$$\frac{1}{2}N_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow NO \tag{1.9}$$

Πρέπει επίσης να ληφθούν υπόψη μικρές συγκεντρώσεις διαφόρων χημικών στοιχείων και ενώσεων όπως είναι: C₂H₂, CH₂CO, C₂H₃, CH₃CN, CH₃CO, C₂H₄, C₂H₄O, CH₃CHO, CH₃COOH, OHCH₂COOH, C₂H₅, C₂H₆, C₂H₅OH, CH₃OCH₃, CH₃O₂CH₃, CCN, CNC, OCCN, C₂N₂, C₂O, C₃, C₃H₃, C₃H₄, C₃H₅, C₃H₆, C₃H₆O, C₃H₇, C₃H₈, CNCOCN, C₃O₂, C₄, C₄H₂, C₄H₄, C₄H₆, C₄H₈, C₄H₉, C₄H₁₀, C₄N₂, C₅, C₅H₆...., HCN, HCO, HNO, HCHO,HCOOH, HO₂, H₂O₂,....,N, NCO, NH, NH₂, NH₃, NH₂OH, NO₃, NCN, N₂, N₃....Περισσότερες πληροφορίες θα δοθούν στο επόμενο κεφάλαιο, όπου και θα περιγραφεί το θεωρητικό υπόβαθρο.

Η χημική ισορροπία είναι το βασικό αντικείμενο μελέτης αυτής της διπλωματικής και περιγράφεται αναλυτικά στις αναφορές [5], [6] και [7]. Στις αναφορές [8] & [9] 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.

1.1.3 <u>Χημική Κινητική</u>

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 [5], [6] και [9], αναλύεται εκτενώς το μοντέλο αυτό.

Η ανάλυση που προηγήθηκε για τη χημική διάσταση έγινε με την προϋπόθεση ότι υπάρχει επαρκές χρονικό διάστημα για να επιτευχθεί 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' [6]. 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 [5], [6] και [9].

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.

1.2 Λογισμικά μοντελοποίησης της καύσης

Μερικά από τα πιο βασικά λογισμικά χημικής ισορροπίας [3], τα οποία μπορεί κάποιος ελεύθερα να τα κατεβάσει από το διαδίκτυο, είναι:

1.2.1 NASA CEA (Chemical Equilibrium with Applications)

Στα περισσότερα από τα διαθέσιμα λογισμικά μοντελοποίησης λειτουργίας αεριοστρόβιλων που χρησιμοποιούνται στη βιομηχανία και στην έρευνα η μοντελοποίηση της καύσης γίνεται με το NASA CEA. Το NASA CEA αποτελεί έναν από τους βασικούς άξονες της παρούσας διπλωματικής εργασίας, τα χαρακτηριστικά και η λειτουργία του οποίου θα παρουσιαστούν στο επόμενο κεφάλαιο.

1.2.2 Gaseq

Το Gaseq παρέχει τη δυνατότητα μελέτης διάφορων προβλημάτων χημικής ισορροπίας όπως η αδιαβατική καύση σε συγκεκριμένη πίεση, 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 προσφέρει τη δυνατότητα πραγματοποίησης υπολογισμών χημικής ισορροπίας για τα εξής μείγματα αντιδρώντων:

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

1.2.3 Access to TPEQUIL, HPFLAME and UVFLAME Software

Το συγκεκριμένο λογισμικό [5] παρέχει τη δυνατότητα επίλυσης τριών ειδών προβλημάτων, hp, tp και uv, ανάλογα με τη θερμοδυναμική κατάσταση στην οποία θα περιέλθει χημική ισορροπία στο μείγμα των προϊόντων. Επίσης μπορεί να μελετηθεί η καύση οποιουδήποτε καυσίμου με μοριακό τύπο της μορφής CmHnOqNr με αέρα ο οποίος έχει σύσταση 79% N₂ και 21% O₂ κατά moles. Δώδεκα είδη θεωρούνται ως πιθανά προϊόντα: H, O, N, H₂, OH, CO, NO, O₂, H₂O, CO₂, N₂ και Ar εάν έχει συμπεριληφθεί στο οξειδωτικό.

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

1.2.4 <u>CHEMKIN II</u>

To CHEMKIN II είναι ένα πρόγραμμα χημικής κινητικής που αναπτύχθηκε από τη Sandia National Laboratories [10]. 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 [10], [11] και [12] υπάρχουν περισσότερες πληροφορίες για το λογισμικό CHEMKIN και τις εκδόσεις του.

1.2.5 Cantera

Το Cantera είναι μια ανοικτή σουίτα [13] 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 από διάφορα πακέτα προγραμματισμού όπως είναι το 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 χρησιμοποιεί τον μηχανισμό αντιδράσεων 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.

1.3 Εμπορικά προγράμματα Προσομοίωσης λειτουργίας Αεριοστροβίλων

Λόγω του ότι οι αεριοστρόβιλοι είναι κυρίαρχες μηχανές στην αεροπορική αγορά [2], [3] και ταυτόχρονα έχουν βρει ευρύτατη εφαρμογή στην παραγωγή ενέργειας, είτε σε απλό, είτε σε συνδυασμένο κύκλο έχουν αναπτυχθεί διάφορα εμπορικά προγράμματα τα οποία επιτρέπουν την ανάλυση λειτουργίας αεριοστροβίλων. Με τη χρήση προγραμμάτων ανάλυσης λειτουργίας αεριοστροβίλων είναι δυνατή η μελέτη των επιδόσεων του αεριοστροβίλου και της συμπεριφοράς των επιμέρους συνιστωσών του για διάφορες συνθήκες λειτουργίας. Επίσης είναι δυνατή η τεχνοοικονομική μελέτη νέων εργοστασίων παραγωγής ενέργειας λαμβάνοντας υπόψη τις ιδιαίτερες απαιτήσεις κάθε εγκατάστασης, ενώ τα προγράμματα προσομοίωσης λειτουργίας μπορούν να χρησιμοποιηθούν και ως εργαλεία εκπαίδευσης. Τα πιο διαδεδομένα εμπορικά προγράμματα ανάλυσης λειτουργίας ανάλυσης αεριοστροβίλων παρουσιάζονται συνοπτικά στη συνέχεια :

1.3.1 PROOSIS (Propulsion Object Oriented Simulation Software)

Για το PROOSIS θα γίνει εκτενής αναφορά στο 3ο κεφάλαιο όπου θα περιγραφεί και η 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.

1.3.2 Gas-Turb

Το εμπορικό πρόγραμμα GasTurb αποτελεί ένα πρόγραμμα ανάλυσης λειτουργίας αεριοστροβίλου 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 το χρήστη ώστε να μην απαιτείται υψηλά εξειδικευμένο προσωπικό για τη χρήση του. Η χρήση γραφικού περιβάλλοντος διασύνδεσης με το χρήστη αποτέλεσε στη συνέχεια βασικό γαρακτηριστικό των εμπορικών προγραμμάτων ανάλυσης κύκλου αεριοστροβίλου. Το πρόγραμμα GasTurb επιτρέπει την ανάλυση λειτουργίας μόνο προκαθορισμένων διατάξεων αεριοστροβίλων και αεροπορικών κινητήρων. To πρόγραμμα GasTurb, έχει αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού Borland Delphi.

1.3.3 <u>GSP</u>

Το εμπορικό πρόγραμμα GSP έχει βασική καινοτομία την ικανότητα καθορισμού από το χρηστή της κάθε συνιστώσας και στη συνέχεια τη διασύνδεση των κάθε επιμέρους συνιστωσών σε μια διάταξη (object oriented). Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατή η μελέτη διαφόρων διατάξεων κύκλου αεριοστροβίλου χωρίς να είναι απαραίτητο να υπάρχουν στην αρχική βιβλιοθήκη του προγράμματος. Ο χρήστης εκτός του ότι έχει τη δυνατότητα να συνδέσει συνιστώσες της αρεσκείας του, μπορεί να τροποποιήσει τις υπάρχουσες συνιστώσες και να δημιουργήσει νέες. Το πρόγραμμα GSP έχει αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού Borland Delphi και χρησιμοποιεί γραφικό περιβάλλον διασύνδεσης.

1.3.4 <u>NPSS</u>

Το πρόγραμμα NPSS (Numerical Propulsion System Simulation) αποτελεί μια συνδυασμένη προσπάθεια του εργαστηρίου Glenn της NASA, εταιριών της αεριοδιαστημικής βιομηχανίας όπως η General Electric και πανεπιστημίων της Αμερικής. Και αυτό το πρόγραμμα βασίζεται στον αντικειμενοστραφή προγραμματισμό (object oriented programming). Η σημαντική καινοτομία αυτού του προγράμματος είναι ότι επιτρέπει τη μοντελοποίηση επιμέρους συνιστωσών με μοντέλα μεγαλύτερης διάστασης από τη μηδενική χωρίς να είναι απαραίτητο όλες οι συνιστώσες να μοντελοποιούνται με μοντέλα ίδιων διαστάσεων. Έτσι π.χ. ο συμπιεστής μπορεί να μοντελοποιηθεί με τη χρήση CFD κώδικα τριών διαστάσεων, ο θάλαμος καύσης ως συνιστώσα μηδενικής διάστασης και ο στρόβιλος με τη χρήση προγράμματος ανάλυσης μέσης γραμμής ως συνιστώσα μίας διάστασης. Αυτός ο τρόπος προσέγγισης επιτρέπει από τη μια την προσαρμογή του προγράμματος στις απαιτήσεις και στις υπολογιστικές δυνατότητες κάθε χρήστη, από την άλλη προσφέρει τη δυνατότητα συγκεκριμένες συνιστώσες οι οποίες ενδιαφέρουν το χρήστη να μοντελοποιηθούν με μεγαλύτερη ακρίβεια ώστε να προσεγγιστεί καλύτερα η συμπεριφορά τους.

1.4 Στόχοι και δομή παρούσας Διπλωματικής εργασίας

Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου στο PROOSIS υπολογίζονται από πίνακες που έχουν παραχθεί από το CEA με δεδομένα τη σύσταση του καυσίμου. Οι βασικές αδυναμίες της συγκεκριμένης διαδικασίας είναι ότι δεν μπορεί να ληφθεί υπόψη η χημική διάσταση των προϊόντων της καύσης αφού οι ιδιότητες προσδιορίζονται συναρτήσει της θερμοκρασίας και της σύστασης του καυσαερίου που εκφράζεται από το λόγο καυσίμου-αέρα (far) και το λόγο νερούαέρα (war). Επίσης προϋποθέτει βαθειά γνώση του CEA προκειμένου να γίνει σωστή χρήση του.

Ο βασικός στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η επέκταση της μοντελοποίησης του εργαζόμενου μέσου που χρησιμοποιείται στην πλατφόρμα

PROOSIS ώστε να λαμβάνεται υπόψη η διάσταση των προϊόντων καύσης. Επίσης η δυνατότητα χρησιμοποίησης καυσίμων διαφορετικών από τα συμβατικά όπως τα εναλλακτικά που έχουν αρχίσει να χρησιμοποιούνται τόσο σε επίγειες όσο και σε αεροπορικές εφαρμογές.

Για να επιτευχθεί ο συγκεκριμένος στόχος έγιναν τα ακόλουθα:

- Αναπτύχθηκε ένας κώδικας με βάση τον κώδικα του CEA που υπολογίζει τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου σε διαφορετικές συνθήκες με τη μέθοδο της χημικής ισορροπίας σε μορφή που μπορεί να εισαχθεί σε λογισμικό προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστροβίλων
- Στη συνέχεια αναπτύχθηκε μια βιβλιοθήκη που χρησιμοποιεί τον συγκεκριμένο κώδικα και καλείται από το PROOSIS για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του εργαζόμενου μέσου.
- Δημιουργήθηκαν νέες συναρτήσεις που υπολογίζουν θερμοδυναμικά μεγέθη οι οποίες χρησιμοποιούν τη νέα βιβλιοθήκη και έγινε αντικατάσταση του υπάρχοντος μοντέλου θαλάμου καύσης.
- Δημιουργήθηκε μια νέα συνιστώσα στο PROOSIS που αντιστοιχεί στο νέο μοντέλο του θαλάμου καύσης, και η οποία ελέγχτηκε τόσο μεμονωμένα όσο και ως συνιστώσα σε μια μηχανή Turbojet.
- Τέλος πραγματοποιήθηκε βιβλιογραφική ανασκόπηση για εναλλακτικά καύσιμα σε αεροπορικούς κινητήρες.

Η παρούσα εργασία αποτελείται από έξι κεφάλαια και δύο παραρτήματα.

Στο πρώτο κεφάλαιο δίνεται μια σύντομη περιγραφή της εργασίας και των στόχων της.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται το πρόγραμμα CEA (Chemical Equilibrium with Applications) της NASA. Αρχικά περιγράφονται το θεωρητικό υπόβαθρο (δηλαδή η επίλυση της χημικής ισορροπίας με ελαχιστοποίηση της εξίσωσης Gibbs), τα χαρακτηριστικά και οι δυνατότητες του, οι υπορουτίνες από τις οποίες αποτελείται, οι βιβλιοθήκες που χρησιμοποιεί και συνοπτικά το γραφικό περιβάλλον που το συνοδεύει. Στη συνέχεια περιγράφεται αναλυτικά ο κώδικας ο οποίος αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία με βάση το CEA και παρουσιάζονται αποτελέσματα από διαφορετικές περιπτώσεις εφαρμογής του.

Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφεται το λογισμικό προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστρόβιλων PROOSIS. Αρχικά δίδονται ορισμένα γενικά στοιχεία για το λογισμικό αυτό και τα χαρακτηριστικά του. Στη συνέχεια παρουσιάζεται το υπάρχον μοντέλο του εργαζόμενου μέσου και ειδικότερα ο τρόπος μοντελοποίησης του θαλάμου καύσης. Στη συνέχεια αναφέρονται τα εγγενή μειονεκτήματα αυτής της μεθόδου. Για την εξάλειψη τους δημιουργείται μια βιβλιοθήκη με βάση τον κώδικα που αναπτύχθηκε στο δεύτερο κεφάλαιο έτσι ώστε να ενσωματωθεί στο πρόγραμμα. Τέλος περιγράφεται ο τρόπος δημιουργίας του νέου μοντέλου θαλάμου καύσης, ενώ συζητείται η μείωση του χρόνου επεξεργασίας μέσω της συρρίκνωσης της θερμοδυναμικής βιβλιοθήκης του CEA.

Στο τέταρτο κεφάλαιο πραγματοποιείται μια συνιστώσα (Component) υλοποίησης του νέου μοντέλου θαλάμου καύσης στο περιβάλλον PROOSIS. Στη

συνέχεια εκτελούνται δυο προσομοιώσεις, μια με μεμονωμένο θάλαμο καύσης και μια με μηχανή Turbojet. Τέλος συγκρίνονται τα μεγέθη της θερμοκρασίας στην έξοδο του θαλάμου καύσης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για το αρχικό μοντέλο του θαλάμου καύσης και το νέο μοντέλο, για πλήρη καύση και για πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης.

Το πέμπτο κεφάλαιο αποτελεί μια βιβλιογραφική ανασκόπηση για εναλλακτικά καύσιμα αεροπορικών κινητήρων. Αναφέρονται οι λόγοι για τους οποίους ενδιαφέρεται η αεροπλοΐα για εναλλακτικά καύσιμα και ποιες είναι οι συγκεκριμένες απαιτήσεις για αυτά. Παρουσιάζονται επίσης ορισμένες οικογένειες καυσίμων και τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα που έχουν. Ειδική αναφορά γίνεται στην πυκνότητα μειγμάτων καθώς στις περισσότερες περιπτώσεις χρησιμοποιούνται εναλλακτικά καύσιμα ως ποσοστό στο συνολικό καύσιμο.

Το έκτο κεφάλαιο αποτελεί μια σύντομη ανακεφαλαίωση της παρούσας εργασίας καθώς επίσης και τα συμπεράσματα που εξήχθησαν από αυτή. Επίσης δίδονται οι κατευθύνσεις που πρέπει να ακολουθηθούν για την περαιτέρω βελτίωση της παρούσας δουλειάς.

Στα παραρτήματα γίνεται η περιγραφή των προγραμμάτων που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της παρούσας εργασίας.

Περιγραφή NASA CEA

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστεί το πρόγραμμα Chemical Equilibrium with Applications (CEA) της NASA. Αρχικά θα περιγραφεί το θεωρητικό υπόβαθρο, η περιγραφή της χημικής ισορροπίας με την ελαχιστοποίηση της εξίσωσης Gibbs. Θα δοθούν ορισμένες πληροφορίες για τις δυνατότητες του και τη δομή του. Ο κώδικας θα αναλυθεί εκτενώς. Τέλος παρουσιάζεται μια ρουτίνα υπολογισμού χημικής ισορροπίας που αναπτύχθηκε με βάσει τον κώδικα του CEA στην οποία όλα τα απαραίτητα δεδομένα δίνονται εξωτερικά (ορίσματα εισόδου).

2.1 Χαρακτηριστικά και δυνατότητες NASA CEA

Το λογισμικό CEA (Chemical Equilibrium with Applications) είναι ένα ευρέως χρησιμοποιούμενο πρόγραμμα για τον προσδιορισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του μέσου που προκύπτει από την οξείδωση μέσων γνωστής σύστασης. Σε αυτό βοήθησε το γεγονός ότι:

- Συνοδεύεται και από μια εκτενή βιβλιοθήκη που περιλαμβάνει δεδομένα για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων 1400 χημικών ενώσεων, χημικών στοιχείων και ιόντων. Περιλαμβάνει επίσης μία βιβλιοθήκη που περιέχει τα απαραίτητα στοιχεία για τον υπολογισμό μεγεθών μεταφοράς θερμότητας για 65 αέρια προϊόντα της καύσης και 42 αλληλεπιδράσεις ζευγών.
- Διατίθενται ελεύθερα στο διαδίκτυο τόσο το πρόγραμμα όσο και οι κώδικες (γεγονός πολύ σημαντικό για την επιστημονική κοινότητα)

Το CEA επίσης μπορεί να κάνει υπολογισμούς για ρευστοδυναμικά μεγέθη όπως είναι η συνεκτικότητα, η θερμική αγωγιμότητα και ο αριθμός Prandtl. Επιπλέον το πρόγραμμα παρέχει τη δυνατότητα στο χρήστη να μελετήσει το πρόβλημα 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 μπορεί να γίνει 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.

2.1.1 Η Χημική ισορροπία στο CEA

Αποδεικνύεται με τη βοήθεια του δεύτερου Θερμοδυναμικού Αξιώματος ότι η συνθήκη για επίτευξη χημικής ισορροπίας σε ένα απομονωμένο σύστημα σταθερής μάζας, όγκου και εσωτερικής ενέργειας είναι [5],[14] :

$$(dS)_{U,V,m=} 0$$
 (2.1)

Η χρήση της παραπάνω εξίσωσης σε προβλήματα χημικής ισορροπίας δεν είναι ιδιαίτερα βολική καθώς προϋποθέτει απομονωμένο σύστημα σταθερής μάζας και όγκου. Συνήθως είναι πιο χρήσιμος ο υπολογισμός της σύστασης ενός μείγματος σε δεδομένη θερμοκρασία, πίεση και στοιχειομετρία. Γι αυτό το σκοπό η εντροπία αντικαθίσταται από την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs.

$$G \equiv H - TS \tag{2.2}$$

Οπότε η αντίστοιχη έκφραση του δεύτερου Θερμοδυναμικού Αξιώματος για σύστημα δοσμένης θερμοκρασίας, πίεσης και μάζας γίνεται:

$$(\mathrm{dG}_{\mathrm{mix}})_{\mathrm{T,P,m}} \le 0 \tag{2.3}$$

Με την ισότητα να ισχύει στη χημική ισορροπία. Στη χημική ισορροπία ισχύει επομένως:

$$dG = \sum_{j=1}^{m} \mu_j n_j = 0$$
 (2.4)

όπου:

$$\mu_{j} = \left(\frac{g_{g}}{g_{n_{j}}}\right)_{T,P,n_{i\neq j}}$$
(2.5)

 n_j : αριθμός των mole ανά κιλό μείγματος για το στοιχείο j.

Σε ένα κλειστό σύστημα δεν υπάρχει εισροή ή εκροή ύλης, οπότε ο συνολικός αριθμός ατόμων κάθε στοιχείου παραμένει σταθερός. Αυτό σημαίνει ότι η ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας κατά Gibbs υπόκειται στον εξής περιορισμό:

$$\sum_{j=1}^{m} a_{ij} n_{j} = b_{i}^{o}$$
(2.6)

όπου:

 $b_i^{\,o}$: συνολικός αριθμός ατόμων στοιχείου i ανά κιλό αντιδρώντων.

Για την επίλυση του προβλήματος ελαχιστοποίησης ορίζεται η συνάρτηση:

$$G = g + \sum_{j=1}^{k} \lambda_{i} \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} N_{j} - b_{i}^{o} \right) = 0$$
(2.7)

όπου λ_i οι πολλαπλασιαστές Lagrange.

Το παραπάνω σύστημα είναι επιλύσιμο καθώς αποτελείται από m+k εξισώσεις με m+k αγνώστους (τα N_j και λ_i) εφόσον τα χημικά δυναμικά είναι γνωστά ως συναρτήσεις των συγκεντρώσεων σε δεδομένη θερμοκρασία και πίεση. Επομένως η συνθήκη για χημική ισορροπία γίνεται:

$$dG = \sum_{j=1}^{m} \left(\mu_j + \sum_{i=1}^{k} \lambda_i a_{ij} \right) \delta N_j + \sum_{i=1}^{k} \left(b_i - b_i^o \right) \delta \lambda_i = 0$$
(2.8)

Θεωρώντας τα διαφορικά ανεξάρτητα πρέπει:

$$\mu_{j} + \sum_{i=1}^{k} \lambda_{i} a_{ij} = 0$$
(2.9)

και

$$\sum_{i=1}^{k} \left(b_i - b_i^{o} \right) = 0 \tag{2.10}$$

Κάνοντας την παραδοχή των ιδανικών αερίων και τη μη συνύπαρξη δύο φάσεων σε ένα στοιχείο το μ (χημικό δυναμικό) παίρνει τις εξής τιμές:

$$\mu = \begin{cases} \mu_j^o + RT \ln \frac{n_j}{n} + RT \ln P, & (j = 1, ..., NG) \\ \mu_j^o & , & (j = NG + 1, ..., m) \end{cases}$$
(2.11)

όπου NG ο αριθμός των αερίων

Ακολουθώντας την διαδικασία που περιγράφεται στο [14] προκύπτουν οι ακόλουθες εξισώσεις:

$$\Delta \ln n_j - \sum_{i=1}^l a_{ij} \pi_i - \Delta \ln n - \frac{H_j^o}{RT} \Delta \ln T = -\frac{\mu_j}{RT}$$
(2.12)

$$-\sum_{i=1}^{l} a_{ij} \pi_i - \frac{H_j^o}{RT} \Delta \ln T = -\frac{\mu_j}{RT}$$
(2.13)

$$\sum_{j=1}^{NG} a_{kj} n_j \Delta \ln n_j + \sum_{j=NG+1}^{NS} a_{kl} \Delta n_j = b_k^o - b_k$$
(2.14)

$$\sum_{i=1}^{NG} n_j \Delta \ln n_j - n \Delta \ln n = n - \sum_{i=1}^{NG} n_j$$
(2.15)

$$\sum_{j=1}^{NG} \frac{n_j H_j^o}{RT} \Delta \ln n_j + \sum_{j=NG+1}^{NS} \frac{H_j^o}{RT} \Delta n_j + \left(\sum_{j=1}^{NS} \frac{n_j C_{p_j}^o}{R}\right) \Delta \ln T = \frac{h_0 - h}{RT}$$
(2.16)

$$\sum_{j=1}^{NG} \frac{n_j S_j}{R} \Delta \ln n_j + \sum_{j=NG+1}^{NS} \frac{S_j^o}{P} \Delta n_j + \left(\sum_{j=NG+1}^{NS} \frac{n_j C_{p_j}^o}{R}\right) \Delta \ln T = \frac{s_o - s}{R} + n - \sum_{j=1}^{NG} n_j$$
(2.17)

όπου π_i = - λ_i /RT και Δlnn_j, Δn_j, Δlnn διορθωτικοί παράγοντες. Οι παραπάνω εξισώσεις χρησιμοποιούν στοιχεία από τις βιβλιοθήκη thermo.lib η οποία θα παρουσιαστεί στην υποπαράγραφο 2.2.1. Η επίλυση αυτών των εξισώσεων γίνεται με αλγεβρική αντικατάσταση ανάλογα με τα δεδομένα κάθε προβλήματος.

2.2 **Δομή CEA**

Το πρόγραμμα CEA απαρτίζεται από τα ακόλουθα στοιχεία:

- Τον πηγαίο κώδικας cea2.for
- Τις βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib

 Την εφαρμογή CEA_GUI που παρέχει ένα γραφικό περιβάλλον για τη δημιουργία του αρχείου εισόδου

Ακολουθεί μια σύντομη περιγραφή για καθένα από τα παραπάνω.

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 thermo.lib και trans.lib 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 βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib περιέχουν τα στοιχεία για θερμοδυναμικούς υπολογισμούς όσο και για τους υπολογισμούς μεγεθών μεταφοράς θερμότητας.

Η εφαρμογή CEA_GUI (Graphical User Interface) η οποία έχει αναπτυχθεί σε γραφικό περιβάλλον Java παρέχει ένα εύκολο τρόπο δημιουργίας του αρχείου εισόδου.

2.2.1 Οι βιβλιοθήκες trans.lib και thermo.lib

Η πρώτη από τις βιβλιοθήκες που αναφέρθηκαν προηγουμένως είναι το αρχείο thermo.inp (ή thermo.lib μετά την πρώτη επεξεργασία του) [14] το οποίο περιέχει όλα τα απαραίτητα δεδομένα για τους θερμοδυναμικούς υπολογισμούς των 60 αντιδρώντων (οξειδωτικών και καυσίμων) και των 1340 προϊόντων (αέριας ή συμπυκνωμένης φάσης) που είναι τυποποιημένα στο NASA CEA. Στο Σχήμα 2.1 φαίνεται η δομή που χρησιμοποιείται στη βιβλιοθήκη για ένα στοιχείο.



Σχήμα 2.1: Βιβλιοθήκη thermo.lib

Οι μοριακές θερμοδυναμικές ιδιότητες ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, ενθαλπία και εντροπία είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας (σε πίεση αναφοράς Pref = 1bar) καθώς γίνεται η υπόθεση των ιδανικών αερίων και περιγράφονται από τις παρακάτω εξισώσεις στη γενική τους μορφή.

$$\frac{C_p^o}{R} = \sum a_i T^{q_i} \tag{2.18}$$

$$\frac{H^o}{RT} = \frac{\int C_p^o dT}{RT}$$
(2.19)

$$\frac{S^{o}}{R} = \int \frac{C_{p}^{o}}{RT} dT$$
(2.20)

Στη βιβλιοθήκη thermo.lib οι σχέσεις αυτές περιγράφονται από τις επόμενες υπό τη μορφή συντελεστών ελαχίστων τετραγώνων για κάθε στοιχείο i. Η φόρμα αυτή περιλαμβάνει επτά όρους για το Cp/R και αντίστοιχους συντελεστές για την ενθαλπία και την εντροπία καθώς και τις σταθερές της ολοκλήρωσης b1 και b2.

$$\frac{\overline{s_i}}{RT} = -a_1 \frac{T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + a_5 \frac{T^2}{2} + a_6 \frac{T^3}{3} + a_7 \frac{T^4}{4} + b_2$$
(2.21)

$$\frac{\overline{h_i}}{RT} = -a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln T + a_3 + a_4 \frac{T}{2} + a_5 \frac{T^2}{3} + a_6 \frac{T^3}{4} + a_7 \frac{T^4}{5} + \frac{b_1}{T}$$
(2.22)

$$\frac{\overline{C_{p_i}}}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln T + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4$$
(2.23)

Υπολογίζοντας επομένως τις θερμοδυναμικές ιδιότητες της κάθε συνιστώσας του καυσαερίου από τις παραπάνω σχέσεις και την αναλογία της καθεμίας στο συνολικό μείγμα (xi ή Yi) με τον κώδικα cea2.for που κάνει εφαρμογή της χημικής ισορροπίας μπορούν να υπολογιστούν οι θερμοδυναμικές ιδιότητες ολόκληρου του καυσαερίου, με την υπόθεση των ιδανικών αερίων.

Η δεύτερη βιβλιοθήκη [14] 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 παραμέτρους αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο στοιχείων (binary interaction parameters). Οι συντελεστές υπολογίζονται με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Η βιβλιοθήκη trans.inp περιέχει 65 αέρια προϊόντα και 42 παραμέτρους αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο στοιχείων (binary interaction parameters). Οι συντελεστές υπολογίζονται με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Η βιβλιοθήκη trans.inp περιέχει 65 αέρια προϊόντα και 42 παραμέτρους αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο στοιχείων (binary interaction parameters). Περιέχει παραμέτρους για τον υπολογισμό της δυναμικής συνεκτικότητας και θερμικής αγωγιμότητας για διαφορετικά εύρη θερμοκρασιών. Η τυπική της δομή για ένα στοιχείο απεικονίζεται στο Σχήμα 2.2.

$$\ln n = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D$$
(2.24)

Παρακάτω περιγράφεται η διαδικασία υπολογισμού της δυναμικής συνεκτικότητας, μέγεθος το οποίο απαιτείται για την διαμόρφωση του μοντέλου εργαζόμενου μέσου, το οποίο συζητείται στη συνέχεια της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

$$n_{mix} = \sum \frac{x_i n_i}{x_i + \sum_{j=1_{j \neq i}}^{NM} \chi_j \phi_{ij}}$$
(2.25)

Όπου χ η κατά μάζα σύσταση του αντιδρώντος.

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{4} \left(1 + \left(\frac{n_i}{n_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{\frac{1}{4}} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{M_j}{M_i + M_j}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.26)

Όπου Μ_i το μοριακό βάρος της ένωσης i

Στην περίπτωση που η αλληλεπίδραση του στοιχείου i με το στοιχείο j υπάρχει στη βιβλιοθήκη χρησιμοποιείται ο ακόλουθος τύπος υπολογισμού:

$$\varphi_{ij} = \frac{n_i}{n_{ij}} \frac{M_j}{M_i + M_j}$$
(2.27)



Σχήμα 2.2: Βιβλιοθήκη trans.lib

Σε περίπτωση ύπαρξης συντελεστών αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο στοιχείων στη βιβλιοθήκη υπάρχουν δεδομένα σε αντίστοιχη μορφή με τα δεδομένα του Σχήμα 2.3:

202	H20	V3C0 SVEHLA (1994)
V 300.0	1000.0	0.56499100E 00-0.32219550E 03 0.26301733E 05 0.26351165E 01
V 1000.0	5000.0	0.68455483E 00-0.33114757E 02-0.58456473E 05 0.16048763E 01
V 5000.0	10000.0	0.70748069E+00 0.11586070E+03-0.22772841E+06 0.13865863E+01

Σχήμα 2.3: Δεδομένα αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο στοιχείων στη βιβλιοθήκη trans.lib

Παρατηρείται ότι ακολουθείται η ίδια μορφή για τα δεδομένα για τα μεμονωμένα στοιχεία.

Για περισσότερες πληροφορίες, όπως για τον τρόπο υπολογισμού άλλων μεγεθών μεταφοράς θερμότητας ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης παραπέμπεται στο εγχειρίδιο χρήσης του προγράμματος [14].

2.2.2 <u>Πηγαίος κώδικας cea2.for</u>

Η γενική ροή μεταξύ των τομέων αλλά και οι υπορουτίνες που σχετίζονται με τον καθένα φαίνονται στο Σχήμα 2.4.

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

2.2.3 Υπορουτίνες CEA

Ο κώδικας cea2.for [14] αποτελείται από τα εξής:

- Το κυρίως πρόγραμμα
- Το μπλοκ δεδομένων (blockdata)
- 24 υπορουτίνες

Όλα τα παραπάνω είναι οργανωμένα σε 8 τομείς (modules),οι οποίοι αφορούν:

- 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)
- υπολογισμούς χημικής ισορροπίας (Equilibrium calculations)
- υπολογισμούς ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας (thermal transport property calculations)
- την παρουσίαση και αποθήκευση των αποτελεσμάτων (output)



Σχήμα 2.4: Τομείς κώδικα cea2.for [14]

1. Τομέας κυρίως προγράμματος και μπλοκ δεδομένων (Main Program and BLOCKDATA Module)

Το κυρίως πρόγραμμα ελέγχει τη ροή δεδομένων μεταξύ των επιμέρους τμημάτων χρησιμοποιώντας τις υπορουτίνες INPUT και SEARCH. Η λειτουργία κάθε υπορουτίνας περιγράφεται στη συνέχεια:

- INPUT: διαβάζει και επεξεργάζεται τα δεδομένα του αρχείου εισόδου.
- SEARCH: διαβάζει και να αποθηκεύει θερμοδυναμικά δεδομένα από τη βιβλιοθήκη thermo.lib κατάλληλα για το συγκεκριμένο χημικό σύστημα.
- 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.

2. Τομέας γενικής επεξεργασίας αρχείου εισόδου (General Input Module)

Ένα αρχείο εισόδου πρέπει να περιλαμβάνει τα ακόλουθα στοιχεία:

- Τύπος προβλήματος
- Τιμές ή εύρος τιμών πειράματος (θερμοκρασία, πίεση κλπ.)
- Λόγος οξειδωτικού καυσίμου
- Αντιδρώντα (καύσιμο και οξειδωτικό) και η σύσταση τους
- Αγνόηση ορισμένων προϊόντων της καύσης ή επικέντρωση μόνο σε ορισμένα

Στο Σχήμα 2.5 παρουσιάζεται ένα τυπικό αρχείο εισόδου.

Σχήμα 2.5: Παράδειγμα αρχείου εισόδου

Το παραπάνω αρχείο εισόδου αφορά τρ πρόβλημα καύσης (επίτευξη χημικής ισορροπίας με δεδομένη θερμοκρασία και πίεση) μεθανίου (CH₄) με υγρό αέρα με λόγο νερού αέρα 10%, σε θερμοκρασία 640.7,660.8 και 683.5 Kelvin, πίεση 12bar, λόγο αέρα καυσίμου 10⁹(πρακτικά άπειρο),50,25 και 16.6667. Μετά την επεξεργασία του κώδικα πέρα από τα αποτελέσματα δημιουργείται ένα αρχείο .plt το οποίο περιέχει τα μεγέθη της πίεσης, της θερμοκρασίας, της ενθαλπίας της εντροπίας του ειδικού λόγου θερμοχωρητικότητας υπό σταθερή πίεση του λόγου γ και του λόγου οξειδωτικού προς καύσιμο.

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 UTHERM και UTRAN που περιγράφηκαν 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 εκτός εάν έχει δοθεί εντολή αγνόησης ή επικέντρωσης σε ορισμένα στοιχεία. Επίσης εάν έχει δοθεί 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 α₁, α₂,..., οι συντελεστές μεγεθών μεταφοράς θερμότητας A, B, C & D, των βιβλιοθηκών thermo.lib και trans.lib (όπως περιγράφηκαν στην υποπαράγραφο 2.2.1) αντίστοιχα 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:

- Αναζητεί στο αρχείο thermo.lib για στοιχεία για τα αντιδρώντα στην περίπτωση που ισχύει κάποιο από τα παρακάτω:
 - Λείπει ο μοριακός τύπος
 - Λείπει η τιμής της απόλυτης ενθαλπίας σε hp πρόβλημα
 - Λείπει η τιμής της εσωτερικής ενέργειας σε uv 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 εμφανίζεται 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 τη διαμόρφωση των ιδιοτήτων 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.

3. Τομέας προεπεξεργασίας δεδομένων (Data- Preprocessing Module)

Ο τομέας προεπεξεργασίας δεδομένων αποτελείται από δύο υπορουτίνες:

- Την υπορουτίνα UTHERM, 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 UTRAN, η οποία καλείται από την υπορουτίνα INPUT σε περίπτωση που ζητείται 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 2.4 δεν συνδέονται 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.

4. Τομέας εφαρμογών (Applications Module)

Ο τομέας των εφαρμογών αποτελείται από έξι υπορουτίνες THERMP, ROCKET, S HCK, 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. Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τις υπορουτίνες αυτές και τα προβλήματα που επιλύουν ο αναγνώστης παραπέμπεται στα εγχειρίδια χρήσης του προγράμματος στις αναφορές [14],[15]. Στη συνέχεια αναλύεται μόνο η υπορουτίνα THERMP.

Η υπορουτίνα THERMP καλείται από το κυρίως πρόγραμμα για επιλύσει τα tp, hp, sp, tv, uv και sv προβλήματα. Επειδή η υπορουτίνα EQLBRM που θα περιγραφεί 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 :

- 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.

5. Τομέας συμπληρωματικής επεξεργασίας των δεδομένων εισόδου (Additional Input- Processing Module)

Οι υπορουτίνες των εφαρμογών της προηγούμενης ενότητας 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 αναφέρθηκε προηγουμένως 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.

6. Τομέας Ισορροπίας (Equilibrium Module)

Ο τομέας ισορροπίας υπολογίζει συστάσεις και θερμοδυναμικές ιδιότητες για ένα συγκεκριμένο σημείο, υλοποιώντας τις εξισώσεις για την χημική ισορροπία με την περιγραφή ελαχιστοποίησης τις εξίσωσης ενέργειας Gibbs (υποπαράγραφος 2.2.1). Ελέγχεται από την υπορουτίνα EQLBRM (η οποία καλείται από τη THERMP) και η οποία με τη σειρά της καλεί τις υπορουτίνες CPHS, MATRIX και GAUSS.

- Η υπορουτίνα CPHS υπολογίζει για ορισμένη θερμοκρασία τις θεμοδυναμικές ιδιότητες του καθενός αερίου προϊόντος σύμφωνα με τις σχέσεις (2.21) – (2.23) για τη ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, την ενθαλπία και την εντροπία.
- 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 περιγραφεί 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.

7. Τομέας ιδιοτήτων μεταφοράς θερμότητας (Transport Properties Module)

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.

8. Τομέας αποτελεσμάτων (Output Module)

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.
2.2.4 Γραφικό περιβάλλον-Καρτέλες

Τον κώδικα του CEA συνοδεύει ένα φιλικό γραφικό περιβάλλον (GUI) [3],[15] που διευκολύνει το χρήστη στον καθορισμό των παραμέτρων που επιθυμεί για την επίτευξη χημικής ισορροπίας. Οι καρτέλες από τις οποίες απαρτίζεται το περιβάλλον αυτό παρουσιάζονται παρακάτω:

1. Καρτέλα Problem

Στην καρτέλα αυτή, η οποία απεικονίζεται στο Σχήμα 2.6, γίνονται τα εξής:

- Ονομάζεται η εφαρμογή (Case) που μελετάται. Το όνομα αυτό πρέπει απαραίτητα να ξεκινάει με κάποιο γράμμα (κεφαλαίο ή πεζό)
- Επιλέγεται εάν στο πρόβλημα θα ληφθούν υπόψη τα ιόντα σαν πιθανά προϊόντα της καύσης. Καθώς ιόντα εμφανίζονται σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες (6000K) όπως συμβαίνει στους πυραύλους η επιλογή αυτή δεν αφορά την καύση αεριοστροβίλων.
- Καθορίζεται ο τύπος του προβλήματος που θα επιλυθεί ανάλογα τη θερμοδυναμική κατάσταση υπό την οποία θα επέλθει χημική ισορροπία στο σύστημα. Όπως είναι γνωστό η θερμοδυναμική κατάσταση ενός συστήματος καθορίζεται πλήρως από τον καθορισμό δύο θερμοδυναμικών μεγεθών

Έτσι ανάλογα με ποια θερμοδυναμικά μεγέθη που χρησιμοποιούνται επιλέγεται και το αντίστοιχο πρόβλημα. Υπάρχουν οι εξής επιλογές.

- Πρόβλημα tp. Η χημική ισορροπία επιτυγχάνεται σε συγκεκριμένη θερμοκρασία και πίεση
- Πρόβλημα hp. Η χημική ισορροπία επιτυγχάνεται σε συγκεκριμένη πίεση και ενθαλπία των προϊόντων της καύσης. Ουσιαστικά επιλέγοντας αυτόν τον τύπο του προβλήματος μελετάμε την ισοβαρή αδιαβατική καύση στους αεριοστροβίλους καθώς η ενθαλπία του μείγματος των αντιδρώντων είναι ίση με την ενθαλπία του μείγματος των προϊόντων.
- Πρόβλημα uv. Χημική ισορροπία επιτυγχάνεται σε συγκεκριμένη εσωτερική ενέργεια και όγκο των προϊόντων της καύσης.
- Πρόβλημα sp. Η χημική ισορροπία επιτυγχάνεται σε συγκεκριμένη εντροπία και πίεση. Στην ουσία πρόκειται για ισεντροπική μεταβολή σε σταθερή πίεση.
- Προβλήματα sv και tv. Χημική ισορροπία σε σταθερή εντροπία και όγκο και σε σταθερή θερμοκρασία και όγκο αντίστοιχα.
- Προβλήματα rkt,det,shock.

Πιο κάτω στην καρτέλα εισάγεται η αναλογία καυσίμου-οξειδωτικού με μια από τις παρακάτω μορφές:

- κατά βάρος περιεκτικότητα αντιδρώντων σε καύσιμο [%f]
- λόγος μαζών οξειδωτικού-καυσίμου [o/f]
- λόγος ισοδυναμίας καυσίμου Φ, δηλαδή ο λόγος του λόγου αέρα καυσίμου, προς τον λόγο αέρα καυσίμου για στοιχειομετρικές συνθήκες

🔏 Chemical Equilibrium with Applications	x
File Activity Help	
Problem Reactant Only Omit Insert Output	
Case ID: Include ions Select ONE Problem Type: Assigned Temperature and Pressure - tp Combustion (Enthalpy and Pressure) - hp Assigned Temperature and Volume - tv Combustion (Internal Energy and Volume) - uv Rocket - rkt Shock tube - shock Chapman-Jouquet Detonation - det Assigned Entropy and Volume - sp Assigned Entropy and Volume - sv	
Reactant Fuel-Oxidant Mixture if not specified in React Dataset Select ONE Fuel-Oxidant Mixture: Percent fuel by weight ratios - o/f Equ ratios in terms of f/o - phi,eq.ratio Chem equ ratios in terms of valences - r,eq.ratio	
Help Save Reset	

Σχήμα 2.6: Καρτέλα Problem

2. Καρτέλα Reactant

Στην επόμενη καρτέλα, την καρτέλα Reactant (Σχήμα 2.7), ορίζονται τα αντιδρώντα (οξειδωτικό και καύσιμο), η σύσταση τους, η θερμοκρασία τους ή η ενθαλπία τους σε προβλήματα που το απαιτούν (όπως το hp πρόβλημα) όπως επίσης και οι μονάδες τις αναλογίας αντιδρώντων (κατά μάζα αναλογία ή τις ποσότητες του καθενός σε moles). Εάν το αντιδρών δεν περιέχεται στη βιβλιοθήκη thermo.lib ο χρήστης δημιουργεί ένα νέο καύσιμο, ονομάζοντας το και εισάγοντας το μοριακό του τύπο και, αν απαιτείται από τον τύπο του προβλήματος, την ενθαλπία του.

				Temperati	ure Unit		Energy	H/U Unit		
rel. v	vt.		•	Kelvin		-	kj/mol			•
Reactant	s Found i	n the Therr	nodynamic	Library:		1	-			
Ident		Na	me		Amount		Ter	np		
fuel oxid		Jet Air	-A(L)		1					
										-
Reactant	s with us	er-provided	I names an	d properit	ies:					
Ident		Name	Amo	unt	Temp		EnergyH	Ener	gyU	
								_		
										-
nter Che	m. Formu	la with ato	mic symbol	s,numbers	s for each	reactant	:			
Sym1	Num 1	Sym2	Num2	Sym3	Num3	Sym4	Num4	Sym5	Num5	
-										-
							_			

Σχήμα 2.7: Καρτέλα Reactant

3. Καρτέλα Only

Στη καρτέλα αυτή (Σχήμα 2.8) δηλώνεται εάν στους υπολογισμούς για τα προϊόντα της καύσης επιθυμείται 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) καθορίζονται ως προϊόντα της χημικής ισορροπίας μόνο τα Ar, CO_2 , H_2O και N_2 (στοιχειομετρία) καθώς και το O_2 στην περίπτωση που υπάρχει περίσσεια αέρα.

Επίσης η καρτέλα αυτή δίνει τη δυνατότητα περιορισμού σε κάποια από τα προϊόντα της καύσης που ενδιαφέρουν ή που βρίσκονται σε μεγαλύτερες ποσότητες από τ' άλλα και έτσι ο κώδικας να συγκλίνει πιο γρήγορα.

4. Καρτέλα Omit

Η καρτέλα αυτή (Σχήμα 2.9) δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη, σε αντιδιαστολή με την προηγούμενη, να ζητήσει 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.

5. Καρτέλα Insert

Στην καρτέλα αυτή (Σχήμα 2.10) ο χρήστης δίνει 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 είναι γνωστή με αρκετή σιγουριά η ύπαρξη του συμπυκνώματος αυτού στο τελικό καυσαέριο.

tivity Help			
Problem Reactant Only* Omit Inse	ert Output		
Come Stanias (150)		Coloritord List(E)	
Gases Species (159)	:	Selected List(5)	
N2H4		Ar	*
N2O		CO2	
N2O3		H2O	
N2O4		N2	
N2O5		02	
N3			
N3H			
0			
ОН			
02			
03	Add		
Condensed Species(3)			
C(gr)	Remove		
H2O(cr)			
H2O(L)			
T			*
() () () () () () () () () ()			

Σχήμα 2.8: Καρτέλα Only

6. Καρτέλα Output

Τέλος στην καρτέλα output (Σχήμα 2.11) καθορίζονται διάφορες παράμετροι για το αρχείο με τα τελικά αποτελέσματα [(όνομα αρχείου).out] όπως μονάδες μέτρησης των αποτελεσμάτων, υπολογισμούς μεγεθών μεταφοράς θερμότητας κλπ. Τέλος μπορεί, κατ'επιθυμία του χρήστη να δημιουργηθεί 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.

🛃 Chemical Equilibrium with Applicati	ions	
File Activity Help		
File Activity Help Problem Reactant Only Omit* Gases Species(159) Ar C C C C C C C C C C C C C	Insert Output Selected List(0) Add Remove	
Help	- Save Reset	•

Σχήμα 2.9: Καρτέλα Omit

- D X
•
•
•

Σχήμα 2.10: Καρτέλα Insert

S Chemical Equilibrium with Applications	
File Activity Help	
Problem Reactant Only Omit Insert Output*	
Energy Unit: Siunits V	mole fractions
Shortened Printout	1 2 3 4 5 6 7 8
Intermediate Output	\circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ
Calculate Thermal Transport Properties	
Trace Species Value	
Select Properties for Plot File:	
Thermodynamic Properties	•
Select a Property:	Selected Plot List:
Pressure - p Temperature - t Density -rho Enthalpy - h Internal Energy - u Gibbs Energy - g Entropy - s Molecular Weight(1/n) - m Molecular Weight - mw Specific Heat - cp Gammas - gam Sonic Velocity - son	Add
List species names separated by a space:	
Help Save	Reset

Σχήμα 2.11: Καρτέλα Output

2.3 Ανάπτυξη βιβλιοθήκης υπολογισμού χημικής ισορροπίας

Όπως φαίνεται και στις προηγούμενες παραγράφους, το CEA αποτελεί ένα πολύ ισχυρό εργαλείο για την μοντελοποίηση καύσης με χημική ισορροπία. Γι αυτό το λόγο αναπτύχθηκε μια ρουτίνα υπολογισμού χημικής ισορροπίας έτσι ώστε να μην απαιτείται αρχείο εισόδου για την εκτέλεση του και να μπορεί να εισαχθεί σε λογισμικό μοντελοποίησης λειτουργίας αεριοστροβίλων. Ο τρόπος με τον οποίο επιτεύχθηκε αυτό παρουσιάζεται παρακάτω.

Όπως αναφέρθηκε και στην υποπαράγραφο 2.2.3 ένα αρχείο εισόδου πρέπει να περιλαμβάνει τα εξής:

- Τύπος προβλήματος
- Τιμές ή εύρος τιμών πειράματος
- Λόγος οξειδωτικού καυσίμου
- Αντιδρώντα και τη σύστασή τους
- Αγνόηση ορισμένων προϊόντων της καύσης ή επικέντρωση μόνο σε ορισμένα

Στον κώδικα που αναπτύχθηκε τα παραπάνω δεδομένα εισόδου ταξινομήθηκαν σε διανύσματα. Γι αυτό το σκοπό δημιουργήθηκαν τέσσερα διανύσματα εισόδου και ένα εξόδου, τα εξής :

Εισόδου

- ibase
- expdat
- dayco
- fuelvec1

Εξόδου

• Prodprops

Παρακάτω παρουσιάζεται η μορφή των διανυσμάτων:

Το διάνυσμα **ibase** περιέχει μόνο τα εξής στοιχεία με ακέραιους αριθμούς και αφορά σε γενικά στοιχεία για το πείραμα:

- Τον τύπο του προβλήματος, κάθε ένας από τους οποίους αντιστοιχεί σε έναν αριθμό (1= hp πρόβλημα 2=tp πρόβλημα 3=sp πρόβλημα)
- 2. Τον αριθμό των καυσίμων που λαμβάνουν μέρος στην χημική αντίδραση
- Τη χημική διάσταση (μη πλήρης διάσταση, διάσταση μόνο με 15 στοιχεία, πλήρης διάσταση)
- 4. Την αγνόηση ή όχι του συμπυκνωμένου νερού
- 5. Καθορισμός τρόπου υπολογισμού λόγου νερού αέρα (war) (1=Με στοιχεία τυπικής ημέρας T=288K,P=1.01325,RH=60% 2=Με εισαγωγή πίεσης και θερμοκρασίας περιβάλλοντος, 3=Απευθείας εισαγωγή του war)

Το διάνυσμα **expdat** περιέχει τα εξής στοιχεία με πραγματικούς αριθμούς και αφορά τις τιμές των μεγεθών στο πείραμα:

- Την πίεση στην οποία συντελείται η χημική ισορροπία (σταθερή για όλα τα είδη προβλημάτων)
- 2. Θερμοκρασία τρ προβλήματος
- 3. Θερμοκρασία αέρα hp προβλήματος
- 4. Θερμοκρασία καυσίμου hp προβλήματος
- 5. Λόγος καυσίμου αέρα (far)
- 6. Λόγος νερού αέρα (war)

Το διάνυσμα **dayco** περιλαμβάνει τα εξής στοιχεία που αφορούν στις συνθήκες περιβάλλοντος:

- 1. Θερμοκρασία περιβάλλοντος (Kelvin)
- 2. Ατμοσφαιρική πίεση (bar)
- 3. Σχετική υγρασία (%)

Το διάνυσμα **fuelvec1** περιλαμβάνει τα εξής στοιχεία σχετικά με τα καύσιμα:

1. Είδος καυσίμου

Στη συνέχεια για κάθε ένα αντιδρών εκλέγεται το είδος του αντιδρώντος μεταξύ του μεθανίου (CH4), Jet-A(g), Jet-A(L), υδρογονάνθρακα του τύπου CH και του γενικού τύπου CHSON.

- 2. Επί τοις εκατό κατά μάζα περιεκτικότητα του συγκεκριμένου αντιδρώντος στο συνολικό καύσιμο.
- Μορφή εισαγωγής δεδομένων (1= Επί τοις εκατό κατά μάζα περιεκτικότητα του στοιχείου, 2=Λόγος των υπόλοιπων στοιχείων προς άνθρακα 3=αριθμός ατόμων στοιχείου στο μόριο)

Για τις τρείς πρώτες περιπτώσεις καυσίμων το πρόγραμμα αντιλαμβάνεται τα στοιχεία αυτά ως στοιχεία της βιβλιοθήκης thermo.lib οπότε δεν χρειάζεται καμία περαιτέρω πληροφορία. Για τις τελευταίες δυο περιπτώσεις όμως ο χρήστης πρέπει να εισάγει την επί τοις εκατό περιεκτικότητα των στοιχείων, το λόγο των υπόλοιπων στοιχείων προς τον άνθρακα ή τον μοριακό τύπο του καυσίμου.

- 4. Περιεκτικότητα σε άνθρακα ή αριθμός ατόμων άνθρακα στο μόριο καυσίμου
- 5. Περιεκτικότητα σε υδρογόνο, λόγος υδρογόνου άνθρακα ή αριθμός ατόμων υδρογόνου στο μόριο καυσίμου
- Περιεκτικότητα σε θείο, λόγος θείου άνθρακα ή αριθμός ατόμων θείου στο μόριο καυσίμου
- Περιεκτικότητα σε οξυγόνο, λόγος οξυγόνου άνθρακα ή αριθμός ατόμων οξυγόνου στο μόριο καυσίμου
- Περιεκτικότητα σε άζωτο, λόγος αζώτου άνθρακα ή αριθμός ατόμων αζώτου στο μόριο καυσίμου

Τα επόμενα δύο στοιχεία του ορίσματος αφορούν μόνο το hp πρόβλημα καθώς για να εκτελεστεί με ακρίβεια χρειάζεται πέραν του μοριακού τύπου του καυσίμου και η ενθαλπία σχηματισμού ή η θερμογόνος δύναμη του. Ο τρόπος με τον οποίο επιτυγχάνεται αυτό αναφέρεται στη συνέχεια αυτής της παραγράφου.

- 9. Επιλογή εισαγωγής κατώτερης θερμογόνου δύναμης ή ενθαλπίας σχηματισμού
- 10. Κατώτερη θερμογόνος δύναμη ή ενθαλπία σχηματισμού

Τα παραπάνω στοιχεία αφορούν το πρώτο καύσιμο. Για τα υπόλοιπα, εφόσον υπάρχουν, ο χρήστης πρέπει να κατασκευάσει μια αντίστοιχη δεκάδα για το 2° καύσιμο (που θα αντιστοιχεί στο fuelvec1(11) έως και το fuelvec1(20) κ.ο.κ)

Το διάνυσμα Prodprops περιλαμβάνει όλα τα στοιχεία εξόδου:

- λόγος ισοδυναμίας καυσίμου Φ, λόγος του λόγου αέρα καυσίμου, προς τον λόγο αέρα καυσίμου για στοιχειομετρικές συνθήκες
- 2. Πίεση (bar)
- 3. Θερμοκρασία (Κ)
- 4. Πυκνότητα (kg/m^3)
- 5. Ενθαλπία (kJ/kg)
- 6. Εντροπία (kJ/kgK)
- 7. Cp (kJ/kgK)
- 8. γ
- 9. MW
- 10. R
- 11. Δυναμική συνεκτικότητα (millipoise)

Ο κώδικας συντάχθηκε με τρόπο τέτοιο ώστε να εκτελείται το CEA χωρίς να χρειαστεί να χρησιμοποιηθεί το GUI (Graphical User Interface) ή κάποιο αρχείο εισόδου. Προφανώς ο νέος κώδικας έπρεπε να υποκαθιστά πλήρως τις λειτουργίες του GUI για τις εφαρμογές που θα εξεταστούν.

Παρακάτω αναφέρονται ορισμένα βασικά στοιχεία του κώδικα που αφορούν στην μορφή των δεδομένων εισόδου με κατάλληλη παραπομπή, όπου κρίνεται απαραίτητο, στο Παράρτημα 1 όπου και παρατίθεται ο κώδικας.

1) Τύπος Προβλήματος

Τύποι προβλημάτων που δεν έχουν σχέση με καύση σε αεριοστρόβιλους ξεφεύγουν από τα όρια και τους σκοπούς της παρούσας διπλωματικής εργασίας ούτε εξυπηρετούν καμία ανάγκη για γραφικές παραστάσεις δεν έχουν συμπεριληφθεί στον κώδικα. Επομένως μπορεί να επιλεγεί η δυνατότητα tp ή hp προβλήματος.

2) Λόγος καυσίμου- αέρα (far)

Η αναλογία καυσίμου αέρα εκφράζεται από τον λόγο καυσίμου αέρα (far) μια μεταβλητή που χρησιμοποιείται στην ανάλυση λειτουργίας αεριοστροβίλων. Στον κώδικα όπως αναφέρθηκε προηγουμένως χρησιμοποιείται ο αντίστροφος αριθμός, δηλαδή ο λόγος αέρα καυσίμου.

3) Λόγος νερού- αέρα (war)

Στο CEA ο λόγος νερού αέρα δίδεται έμμεσα μέσω της περιεκτικότητας του νερού ως ποσοστό επί τοις εκατό στο συνολικό οξειδωτικό. Στον κώδικα αυτό επιλέγεται να εισάγεται η έκφραση του λόγου νερού αέρα και όχι ποσοστό επί τοις εκατό στο συνολικό οξειδωτικό. Για να εκφραστεί η περιεκτικότητα του ατμοσφαιρικού αέρα σε υδρατμό ακολουθείται τη διαδικασία που περιγράφεται από τον Τσαλαβούτα [4].

Η πίεση κορεσμού του υδρατμού υπολογίζεται συναρτήσει της θερμοκρασίας από μια πολυωνυμική σχέση πέμπτου βαθμού

$$P_{\nu,sat} = \left(\sum_{i=1}^{5} A_{i-1} \cdot T^{i-1}\right) / 100(bar)$$
(2.28)

Οι τιμές των συντελεστών Α της σχέσης δίνονται από τον Πίνακας 2.1 και όπου Τα η ατμοσφαιρική θερμοκρασία (Kelvin). Η σχέση προσδιορίστηκε από την επεξεργασία των στοιχείων που δίνονται σε πίνακες ατμού και ισχύει για θερμοκρασίες που κυμαίνονται από 0⁰ έως 100⁰ βαθμούς Κελσίου.

Συντελεστής	Τιμή
A_0	-2800.567604
A_1	54.657363
A_2	-0.4283197092
A ₃	$1.6863822 \ 10^{-3}$
A_4	-3.339372843 10 ⁻⁶
A ₅	2.663484097 10-9

Πίνακας 2.1: Συντελεστές σχέσης υπολογισμού πίεσης κορεσμού υδρατμών

Με γνωστή την ατμοσφαιρική πίεση και την σχετική υγρασία (RH) υπολογίζεται ο λόγος νερού αέρα από τη σχέση

$$war = 0.622 \frac{P_{v,sat}}{\frac{P_{v,sat}}{RH} - P_{v,sat}}$$
(2.29)

Εναλλακτικά ο χρήστης μπορεί να επιλέξει τον υπολογισμό του λόγου νερού αέρα με συνθήκες τυπικής ημέρας (T=288K,P=1.01325bar,RH=60%) μέσω της παραπάνω διαδικασίας ή να εισάγει συγκεκριμένη τιμή.

4) Είδος και σύσταση αντιδρώντων

Αφού έχει καθοριστεί ο αριθμός των καυσίμων που λαμβάνουν μέρος στη χημική αντίδραση ο χρήστης καλείται να εισάγει δεδομένα για τα καύσιμα που αφορούν στη σύσταση τους. Για κάθε ένα αντιδρών εκλέγεται το είδος του αντιδρώντος μεταξύ του μεθανίου (CH4), Jet-A(g), Jet-A(L), υδρογονάνθρακα του τύπου CH και του γενικού τύπου CHSON. Για τις τρείς πρώτες περιπτώσεις καυσίμων το πρόγραμμα αντιλαμβάνεται τα στοιχεία αυτά ως στοιχεία της βιβλιοθήκης thermo.lib οπότε δεν χρειάζεται καμία περαιτέρω πληροφορία.

Στη γενική περίπτωση καυσίμου CHSON ο χρήστης πρέπει να εισάγει την επί τοις εκατό περιεκτικότητα των στοιχείων, το λόγο των υπόλοιπων στοιχείων προς τον άνθρακα ή τον μοριακό τύπο του καυσίμου, εφόσον είναι διαθέσιμος ο τελευταίος, πράγμα που σε λίγες περιπτώσεις ισχύει. Οι τρείς αυτές μορφές είναι οι συνηθέστεροι τρόποι έκφρασης (ή προσέγγισης) του μοριακού τύπου μιας ένωσης. Το hp πρόβλημα μπορεί να εκτελεστεί μόνο αν είναι γνωστός ο μοριακός τύπος (άρα και το μοριακό βάρος) και η ενθαλπία του καυσίμου στη δεδομένη θερμοκρασία. Το πρόγραμμα μπορεί να υπολογίσει την ενθαλπία σχηματισμού μέσω της κατώτερης θερμογόνου δύναμης με βάση την ακόλουθη διαδικασία:

Κρίνεται σκόπιμο να αποσαφηνιστούν πρώτα οι έννοιες της απόλυτης ενθαλπίας και της ενθαλπίας σχηματισμού.

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

$$h(T) = h_{f}^{o}(T_{ref}) + \Delta h_{s}(T)$$
(2.30)

ως το άθροισμα δηλαδή της ενθαλπίας σχηματισμού h_f^0 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. 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 υπάρχουν ελεύθερα στη φύση όπως Ar, O₂, N₂ κτλ. η ενθαλπία σχηματισμού είναι μηδενική. Στη θερμοδυναμική βιβλιοθήκη του CEA (thermo.inp) υπάρχουν οι απαραίτητοι συντελεστές (α_1 , α_2 , κτλ.) προκειμένου να υπολογιστεί η 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. Λαμβάνει χώρα η αντίδραση:

$$C_{m}H_{n}S_{p}O_{q}N_{r} + \left\{m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2}\right\}\left[O_{2} + 3.76N_{2}\right] \rightarrow mCO_{2} + \frac{n}{2}H_{2}O + \left\{m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2}\right\}\left[3.76N_{2}\right] + pSO_{2} + \frac{r}{2}N_{2}$$

$$(2.31)$$

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.:

$$\Delta h_{\rm R} \left(T_{\rm ref} \right) = H_{\rm prod}(T_{\rm ref}) - H_{\rm reac}(T_{\rm ref})$$
(2.32)

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

$$HV(T_{ref}) = H_{reac}(T_{ref}) - H_{prod}(T_{ref})$$
(2.33)

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

$$LHV(Tref) = (1) \times h_{C_m H_n S_p O_q N_r}(Tref) + \left\{ m + \frac{n}{4} + p - \frac{q}{2} \right\} \times h_{02}(Tref) - m \\ \times h_{co2}(Tref) - \frac{n}{2} \times h_{H2O}(Tref) - p \times h_{SO2}(Tref) - \frac{r}{2} \\ \times h_{N2}(Tref)$$
(2.34)

Έχοντας επομένως:

- την (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

μπορεί να υπολογιστεί η απόλυτη ενθαλπία του καυσίμου $h_{C_m H_n S_p O_q N_r}$ και να εκτελεστούν οι επιθυμητοί υπολογισμοί με το CEA.

5) Διάσταση προϊόντων της καύσης

Μια επιλογή μεγάλης σημασίας για την ακρίβεια του μοντέλου. Με αυτή την επιλογή ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να επιλέξει την θεώρηση που επιθυμεί. Ειδικά για τη διάσταση μόνο με 15 προϊόντα έχουν επιλεγεί τα ακόλουθα: N₂, O₂, Ar, H₂O, CO₂, CO, O, OH, H, H₂, HO₂, NO₂, NO, N₂O, NH₃

Τα στοιχεία αυτά έχουν επιλεγεί από τον Turns [5] και προκύπτουν από πολλαπλές εκτελέσεις του CEA για το Jet-A σε διάφορες συνθήκες. Η επιλογή αυτή με άλλα λόγια έχει προκαθορισμένες επιλογές στην καρτέλα 'only' του CEA. Η ευκολία αυτής της επιλογής είναι ένας από τους κύριους λόγους τροποποίησης του CEA με σκοπό την εισαγωγή του στο PROOSIS. Ο Καποδίστριας [3] μελέτησε 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 πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία είναι μόνο τα Ar, CO₂, H₂O, N₂ και O₂ καθώς και με το μοντέλο της πλήρης διάστασης των προϊόντων της καύσης (dissociation model), όπου όλα τα στοιχεία να λαμβάνονται υπόψη σαν πιθανά προϊόντα κατά τη χημική ισορροπία. Καταλήγει στα εξής συμπεράσματα:

- Τα φαινόμενα χημικής διάστασης γίνονται αισθητά για θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 1500K, που επιτυγχάνονται εύκολα στο θερμό κομμάτι των αεριοστρόβιλων.
- Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία και όσο μειώνεται η πίεση τα φαινόμενα της χημικής διάστασης γίνονται εντονότερα (όπως προβλέπει και η 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 αεριοστρόβιλων [περίπου P_{t4} =20atm και T_{t4} = 2000K], εισάγει αποκλίσεις της τάξης του :

- 2-3% για το γ
- 7-8% για το Cp
- 2% για το R

σε σχέση με το μοντέλο χημικής διάστασης. Επίσης για μείγμα αντιδρώντων κοντά σε στοιχειομετρική αναλογία η απόκλιση της θερμοκρασίας φτάνει τους 60K σε σχέση με την τιμή που προκύπτει από το μοντέλο της χημικής διάστασης. Είναι επομένως απαραίτητο να υπάρχει το μοντέλο της πλήρους διάστασης, καθώς τα σφάλματα είναι αρκετά σημαντικά για να αγνοηθούν.

Τέλος, από τον αρχικό κώδικα αφαιρέθηκαν υπορουτίνες που ήταν σχετικές με τύπους προβλημάτων που ξέφευγαν από τους σκοπούς της παρούσας εργασίας.

2.4 Επιβεβαίωση του νέου κώδικα

Στα πλαίσια της επιβεβαίωσης του νέου κώδικα, αυτός συγκρίθηκε με το αρχικό λογισμικό CEA ως προς τα αποτελέσματα που εξάγει σε μια σειρά από δοκιμές, ώστε να εξακριβωθεί εάν υπάρχουν αποκλίσεις μεταξύ τους. Επιλέχθηκε να γίνουν οι δοκιμές με Jet-A (L) στις εξής συνθήκες:

- Πίεση 12 bar
- Θερμοκρασία (σε περίπτωση tp προβλήματος) ή θερμοκρασία εισόδου αέρα στο θάλαμο καύσης (σε περίπτωση hp προβλήματος) 640.7,660.8 και 683.5 Kelvin
- Λόγος καυσίμου αέρα (fuel to air ratio, far) 0,0.02,0.04,0.06 δηλαδή o/f (oxid to fuel weight ratio)10⁹ (πρακτικά άπειρο),50,25,16.6667
- Λόγος νερού αέρα(water to air ratio, war) 0 και 0.1(Στο CEA η αντίστοιχη αναλογία γράφεται rel.wt. (Σχετική περιεκτικότητα κατά μάζα) 0.90909091 για τον αέρα και 1-0,90909091=0,09090909 για το νερό. Η παραπάνω αντιστοιχία προκύπτει από τη σχέση:

$$X_{H_2O} = \frac{war}{1 + war} \tag{2.35}$$

Σταθερή σύσταση ή πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης

Οι παραπάνω θερμοκρασίες προέκυψαν από την παρακάτω σχέση ώστε να βρεθούν τυπικές τιμές για την θερμοκρασία εισόδου στο θάλαμο καύσης με ισεντροπικό βαθμό απόδοσης συμπιεστή 0.8,0.85 και 0.9, $T_{z2} = 298.15$ K, $\gamma = 1.4$ και λόγο πίεσης συμπιεστή 12:

$$T_{t3} = T_{t2} \left[1 + \frac{1}{n} \left(\pi_c^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right) \right]$$
(2.36)

Καταγράφηκαν τα μεγέθη H, S, Cp, γ και T (μόνο στο hp πρόβλημα) και σημειώθηκαν τα σχετικά σφάλματα επί τοις εκατό μεταξύ των αποτελεσμάτων του CEA και του κώδικα. Η σχέση που χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση του σφάλματος ήταν η ακόλουθη:

$$err = 100 \cdot \frac{K_{routine} - K_{CEA}}{K_{CEA}}$$
(2.37)

Όπου:

$$\begin{split} K_{routine} &: H \mbox{tim} \ fou \ meggebous a point in restelles to the second s$$

Εφόσον δεν παρατηρόντουσαν σφάλματα για μια σειρά από τρεξίματα, θα μπορούσε να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι τα δυο αυτά προγράμματα είναι απολύτως ισοδύναμα. Τα σφάλματα που παρατηρήθηκαν σε όλο το εύρος των τιμών που επιλέχθηκαν ήταν πολύ ικανοποιητικά και για τους δύο τύπους προβλημάτων (hp και tp) όπως επίσης και για τον τύπο της χημικής διάστασης, δηλαδή για dissociation και για no

dissociation. Εάν στρογγυλοποιηθούν τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τον κώδικα με 5 σημαντικά ψηφία, όσα δηλαδή και στο CEA, τα αποτελέσματα σχεδόν ταυτίζονται.

	M.O	
	Σφαλμάτων %	
	no dissosiation	Dissosiation
Н	0,003388728	0,003517688
S	0,000204576	0,000129484
Ср	0,000888769	0,00024684
γ	-0,000213656	0,000213716

Για το τρ πρόβλημα τα σχετικά σφάλματα παρουσιάζονται στον Πίνακας 2.2:

Πίνακας 2.2: Σχετικά σφάλματα προβλήματος tp

Για το hp πρόβλημα τα σχετικά σφάλματα παρουσιάζονται στον Πίνακας 2.3:

	M.O	
	Σφαλμάτων %	
	no dissosiation	Dissosiation
Н	0,007016975	0,007018752
S	-0,003880292	-0,00339882
Ср	0,000525057	0,00143749
γ	0,000273188	-0,00010373
Т	0,000571231	-4,2948E-06

Πίνακας 2.3: Σχετικά σφάλματα προβλήματος hp

Οι ελάχιστες διαφοροποιήσεις που παρατηρούνται είναι αποτέλεσμα της διαφορετικής μορφής των μεγεθών όσον αφορά στα σημαντικά ψηφία και τις στρογγυλοποιήσεις. Όπως αναμενόταν ανάλογα αποτελέσματα παρατηρήθηκαν και στα αποτελέσματα για καύση μεθανίου (CH₄) σε tp πρόβλημα στις ίδιες θερμοκρασίες και σε μείγμα 50-50% μεθανίου Jet-A(g) με πλήρη διάσταση των προϊόντων.

Επομένως μπορεί να θεωρηθεί ότι ο κώδικας αναπαράγει το CEA με ακρίβεια και έτσι μπορεί να εισαχθεί στο PROOSIS, και γενικά σε οποιοδήποτε πρόγραμμα μοντελοποίησης λειτουργίας αεριοστροβίλων.

2.5 Σύνοψη-Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάστηκε εκτενώς το λογισμικό CEA. Αρχικά περιγράφηκε το θεωρητικό υπόβαθρο δηλαδή οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται κατά τη χημική ισορροπία, με τη μέθοδο της ελαχιστοποίησης της ελεύθερης ενέργειας κατά Gibbs. Ακολούθησε εκτενής περιγραφή του κώδικα και των υπορουτινών από τις οποίες αποτελείται. Σημαντικά δομικά στοιχεία είναι και οι βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib από τις οποίες λαμβάνονται τα απαραίτητα δεδομένα για τα χημικά στοιχεία που λαμβάνουν μέρος στις χημικές αντιδράσεις. Καθώς αποτελούν σημαντικά εργαλεία για την παρούσα εργασία η δομή τους περιγράφηκε εκτενώς. Το CEA συνοδεύεται και από ένα γραφικό περιβάλλον το οποίο παρουσιάστηκε συνοπτικά.

Στη συνέχεια αναπτύχθηκε κώδικας με βάση το CEA έτσι ώστε να μην είναι απαραίτητη η δημιουργία αρχείου εισόδου για την εκτέλεση του. Ο νέος κώδικας επιβεβαιώθηκε με μια σειρά από δοκιμές για την ορθότητα των αποτελεσμάτων που εξάγει. Η τροποποίηση αυτή έγινε κατά τρόπο τέτοιο ώστε να μην μειώνονται οι δυνατότητες του προγράμματος για την καύση στους αεριοστροβίλους, δηλαδή την εφαρμογή που αφορά την παρούσα διπλωματική εργασία. Ο νέος κώδικας στη συνέχεια ενσωματώνεται σε πρόγραμμα προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστροβίλων.

3 Εισαγωγή του ΝΑSΑ CEA στο PROOSIS

Το παρόν κεφάλαιο αφορά την εισαγωγή του NASA CEA στο λογισμικό PROOSIS. Αρχικά θα περιγραφεί η υπάρχουσα μέθοδος που χρησιμοποιείται στο PROOSIS από την διαμόρφωση του εργαζόμενου μέσου μέχρι την διαμόρφωση των θερμοδυναμικών μεγεθών και θα παρουσιαστούν τα εγγενή της μειονεκτήματα. Στη συνέχεια παρουσιάζεται ο τρόπος αντικατάστασης του μοντέλου εργαζόμενου μέσου που συνίσταται στην εισαγωγή της μεθόδου ανάλυσης χημικής ισορροπίας με τον κώδικα που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσης διπλωματικής εργασίας και την τροποποίηση των βιβλιοθηκών του PROOSIS. Δεδομένου του ότι η καύση συντελείται στο θάλαμο καύσης, ο κώδικας του θα αναλυθεί διεξοδικά. Τέλος παρουσιάζεται η δυνατότητα αξιοποίησης του κώδικα CEA εκτός από tp προβλήματα.

3.1 Σύντομη περιγραφή PROOSIS

Το PROOSIS (Propulsion Object Oriented Simulation Software) είναι ένα περιβάλλον προσομοίωσης λειτουργίας αεροστροβίλων το οποίο αναπτύχθηκε στα πλαίσια του Ευρωπαϊκού προγράμματος VIVACE από μία ομάδα ευρωπαϊκών πανεπιστημίων, ερευνητικών ιδρυμάτων και από τη βιομηχανία. Βασίζεται στο EcosimPro ένα εργαλείο προσομοίωσης που αναπτύχθηκε από την Empresarios Agrupados International για τη μοντελοποίηση κάθε φυσικής διεργασίας η οποία εκφράζεται από διαφορικές και αλγεβρικές εξισώσεις.

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, ESOCENET, Turbomecha SA, Volvo Aero Corporation, Snecma, Iberespacio, NLR, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Πανεπιστήμιο Στουτγάρδης.

Το PROOSIS δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να διασυνδέσει τις επιμέρους συνιστώσες σε μια διάταξη. Έτσι μπορούν να δημιουργηθούν εξελιγμένα και πολύπλοκα μοντέλα μηχανών συνδέοντας βασικές συνιστώσες του αεριοστρόβιλου 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.

Το PROOSIS επιτρέπει πολλών ειδών προσομοιώσεις λειτουργίας αεριοστροβίλων και των υποσυστημάτων τους (ελέγχου, θερμικών, υδραυλικών, μηχανικών). Έχει τη δυνατότητα να εκτελέσει υπολογισμούς μόνιμης και μεταβατικής λειτουργίας. Επιπλέον το PROOSIS μπορεί να συνδεθεί με άλλα προγράμματα υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD) και πεπερασμένων στοιχείων (FEA). Αυτό καθιστά το PROOSIS ένα πολύ σημαντικό εργαλείο για όλο τον κύκλο ζωής ενός κινητήρα από την προκαταρκτική και τη λεπτομερή σχεδίαση μέχρι την τεχνική υποστήριξη και συντήρηση του κινητήρα.

3.1.1 Χαρακτηριστικά PROOSIS

Το PROOSIS χρησιμοποιεί μια γλώσσα αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού (object oriented), την EL. Η γλώσσα αυτή παρέχει στο χρήστη όλα τα πλεονεκτήματα αυτού του είδους προγραμματισμού: κληρονομικότητα (inheritance), πολυμορφισμός (polymorphism) ενθυλάκωση (encapsulation) κλπ. Κληρονομικότητα αποκαλείται η δυνατότητα να δημιουργούνται νέα components βασιζόμενα στα ήδη υπάρχοντα, πολυμορφισμός είναι η δυνατότητα του προγράμματος να χρησιμοποιεί εναλλακτικά μεθόδους και ιδιότητες σε διαφορετικές συνιστώσες (components) ενώ έχουν δηλωθεί με το ίδιο όνομα. Ενθυλάκωση προσφέρει την δυνατότητα να κρύψει τις ιδιότητες και τις μεθόδους που βρίσκονται μέσα σε μια συνιστώσα.

Η συνιστώσα (Component) είναι το πιο σημαντικό στοιχείο στη γλώσσα ΕL. Περιέχει μια μαθηματική περιγραφή της αντίστοιχής πραγματικής συνιστώσας μιας μηχανής (π.χ. συμπιεστής, στρόβιλος, θάλαμος καύσης, ακροφύσιο). Οι συνιστώσες επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω των θυρών (Ports) . Οι Θύρες ορίζουν τις μεταβλητές που θα μοιράζονται δύο συνιστώσες (π.χ. παροχή μάζας, πίεση η θερμοκρασία σε μία Θύρα Εργαζόμενου μέσου (Fluid Port) ή η ταχύτητα περιστροφής και η ροπή αδρανείας σε μια μηχανική Θύρα (mechanical Port). Οι συνιστώσες και οι Θύρες βρίσκονται σε βιβλιοθήκες (Libraries). Κάθε βιβλιοθήκη ανάλογα με το είδος και τη διεργασία που μοντελοποιεί εμπεριέχει διαφορετικές συνιστώσες και θύρες. Οι συνιστώσες των αεριοστροβίλων και οι θύρες τους είναι αποθηκευμένες στη βιβλιοθήκη Turbo.

Ο χρήστης πρέπει να γνωρίζει τις μαθηματικές επιπτώσεις που έχει η σύνδεση συνιστωσών και πρέπει να καθορίσει το σχετικό μαθηματικό μοντέλο. Στο PROOSIS αυτό ονομάζεται Partition και καθορίζεται μέσω wizards. Μαθηματικοί αλγόριθμοι επεξεργάζονται τις εξισώσεις συμβολικά, προτείνουν οριακές συνθήκες και ορίζουν τις εξισώσεις για βέλτιστο υπολογισμό αφού στο PROOSIS η σειρά και η μορφή των εξισώσεων δεν επηρεάζει τον τρόπο επίλυσης.

Για ένα δεδομένο Partition ο χρήστης μπορεί να εκτελέσει προσομοιώσεις, οι οποίες στο PROOSIS ονομάζονται 'Πειράματα' (Experiments). Χρησιμοποιώντας wizards ή την γλώσσα EL ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να καθορίσει τα δεδομένα του προβλήματος (οριακές συνθήκες, μεταβλητές και διάφορα δεδομένα για τις συνιστώσες) για προβλήματα ενός ή πολλαπλών σημείων σχεδίασης για μόνιμη ή μεταβατική λειτουργία και για λειτουργία εκτός σημείου σχεδίασης.

3.2 Μοντέλα Εργαζόμενου Μέσου

Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του εργαζόμενου μέσου προσδιορίζονται από πίνακες (fluid models) σε xml μορφή. Το PROOSIS υποστηρίζει μέχρι στιγμής τη χρήση <u>τρισδιάστατων πινάκων</u>. Οι πίνακες που χρησιμοποιούνται συσχετίζουν τις ιδιότητες με το λόγου καυσίμου αέρα, λόγο νερού και την θερμοκρασία. Για το PROOSIS το εργαζόμενο μέσο στους αεριοστρόβιλους 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 εξής ιδιότητες για το εργαζόμενο μέσο:

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

$$h(T) = h_{Tref} + \int_{Tref}^{T} C_p(T) dT$$
(3.1)

όπου T_{ref} μια ορισμένη θερμοκρασία αναφοράς (συνήθως 298.15K) και Cp(T) είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση σα συνάρτηση της θερμοκρασίας

• Συνάρτηση εντροπίας φ (J/(kg*K))

$$\varphi = \int_{T_2}^{T_{ref}} \frac{C_p}{T} dT = S(T_2, P_2) - S(T_{ref}, P_{ref}) + R \times \ln\left(\frac{P_2}{P_{ref}}\right)$$
(3.2)

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 $T_{ref} = 298.15$ K και $P_{ref} = 1$ bar όπως στο NASA CEA.

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

$$R = \frac{R_u}{M} = \frac{8.3143}{M} J / (molK)$$
(3.3)

όπου Μ 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 μέσω της σχέσης:

$$\operatorname{Re} = \rho * D * V / \mu \tag{3.4}$$

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

Τα παραπάνω μεγέθη προκύπτουν ως γραμμική συνάρτηση των τριών παραμέτρων:

- Λόγος νερού καυσίμου (war)
- Θερμοκρασία ή ο λογάριθμος της θερμοκρασίας (για τον υπολογισμό της συνάρτησης εντροπίας)
- Λόγος αέρα καυσίμου (far)

Σύμφωνα με το 2° νόμο του Joule η εσωτερική ενέργεια ενός ιδανικού αερίου είναι ανεξάρτητη του όγκου και της πίεσης και είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας. Αυτό όμως ισχύει μόνο για το μοντέλο που υποθέτει σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης (no dissociation) καθώς η πίεση επηρεάζει τη χημική διάσταση. 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 επομένως μεταβάλλονται και οι ιδιότητες του καυσαερίου. Αυτό είναι λοιπόν ένα μειονέκτημα του PROOSIS και αυτής της μεθόδου.

3.2.1 Δημιουργία και επεξεργασία μοντέλων εργαζόμενου μέσου

Για την δημιουργία ενός μοντέλου εργαζόμενου μέσου χρειάζεται να δημιουργηθεί ένας πίνακας xml με τα προαναφερθέντα μεγέθη για κάθε καύσιμο για ένα εύρος τιμών θερμοκρασίας, λόγου καυσίμου αέρα και λόγου νερού-αέρα. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούνται προγράμματα (στην προκειμένη περίπτωση το CEA) χημικών αντιδράσεων.

Συνοπτικά με αυτή τη μέθοδο πρέπει να γίνουν τα εξής:

 Να δημιουργηθεί μέσω του GUI ή απευθείας το αρχείου εισόδου στο οποίο θα δηλώνεται το θερμοκρασιακό εύρος ο λόγος καυσίμου αέρα και λόγος νερού αέρα. Σημειώνεται ότι πρέπει να δημιουργηθεί ξεχωριστό αρχείο εισόδου για σταθερή σύσταση και για πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης. Για την πρώτη περίπτωση η πίεση πειράματος που επιλέγεται δεν επηρεάζει την σύσταση των παραγομένων προϊόντων ενώ στη δεύτερη την επηρεάζει (αρχή Le Chatelier), οπότε αναγκαστικά εκλέγεται μια ενδεικτική τιμή της πίεσης, για παράδειγμα ο Καποδίστριας [3] επιλέγει πίεση 50 bar για την επίτευξη χημικής ισορροπίας.

- 2. Τα μεγέθη h, S, mu και γ να εμφανιστούν στα αρχεία εξόδου plt.
- Αυτά τα αρχεία να μετατραπούν σε αρχεία xml. Αφού πρώτα γίνουν οι μετατροπές στα αποτελέσματα όπως αναφέρονται στην προηγούμενη παράγραφο ώστε να είναι συμβατά με το PROOSIS.

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για κάθε καύσιμο και για κάθε τιμή της πίεσης στη χημική ισορροπία. Το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου που χρησιμοποιεί τις ιδιότητες του πίνακα υλοποιείται με τη βοήθεια των βιβλιοθηκών <u>Funcsfluid</u> και <u>Funcstherm</u> η οποίες περιέχονται στη βιβλιοθήκη **Turbo**.

Η βιβλιοθήκη **Funcsfluid** περιλαμβάνει τις πέντε ευθείς συναρτήσεις του Πίνακας 3.1 και τις δύο αντίστροφες συναρτήσεις του Πίνακας 3.2 που υπολογίζουν τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του μέσου συναρτήσει των τριών ανεξάρτητων μεταβλητών.

	Όνομα συνάρτησης	Δεδομένα εισόδου
1	R_FARB	fluid,T,FARB,WAR
2	gam_T	fluid,T,FARB,WAR
3	h_T	fluid,T,FARB,WAR
4	phi_T	fluid,T,FARB,WAR
5	mu_T	fluid,T,FARB,WAR

Πίνακας 3.1: Συναρτήσεις της Funcsfluid

Σε περίπτωση που ζητείται να υπολογιστεί η θερμοκρασία με δεδομένη ενθαλπία ή εντροπία, ανάλογα με τα δεδομένα του εκάστοτε προβλήματος μέσω επαναληπτικής διαδικασίας χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της τέμνουσας.

	Όνομα συνάρτησης	Δεδομένα εισόδου
1	T_h	fluid,h,FARB,WAR
2	T_phi	fluid,phi,FARB,WAR

Πίνακας 3.2: Αντίστροφες συναρτήσεις Funcsfluid

Η βιβλιοθήκη **Functherm** περιέχει δώδεκα θερμοδυναμικές συναρτήσεις [16] που υπολογίζουν μεγέθη της ροής (π.χ. στατική πίεση και θερμοκρασία). Η Funcstherm χρησιμοποιεί και συναρτήσεις που εμπεριέχονται στην Funcsfluid. Για περισσότερες πληροφορίες ο αναγνώστης παραπέπεμπεται στη βιβλιογραφία [16].

Το μοντέλα των διαφόρων συνιστωσών χρησιμοποιούν ανάλογα με τις ανάγκες τις δύο παραπάνω βιβλιοθήκες. Ιδιαίτερης αναφοράς χρήζει η συνιστώσα του θαλάμου καύσης

καθώς εκεί συντελείται η καύση οπότε εκεί διαμορφώνεται το εργαζόμενο μέσο. Ο τρόπος μοντελοποίησης του θαλάμου καύσης θα περιγραφεί αναλυτικά στη συνέχεια.

3.3 Η συνιστώσα Burner

Η βιβλιοθήκη Turbo περιέχει δύο συνιστώσες που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωση ενός θαλάμου καύσης ενός αεριοστροβίλου: την Burner και την Burner_Emissions, η λειτουργία των οποίων περιγράφεται από τους Αλεξίου και Τσαλαβούτα [16]. Το μαθηματικό μοντέλο και των δύο συνιστωσών καθορίζει την πίεση και την θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης ή την παροχή καυσίμου για δεδομένες συνθήκες εισόδου, κάνοντας την υπόθεση ότι η καύση είναι αδιαβατική. Υπολογίζονται επίσης οι τιμές παροχής μάζας στην έξοδο του θαλάμου καύσης, του λόγου καιόμενου (Burnt Fuel to Air Ratio, FARB) και άκαυστου καυσίμου αέρα (Unburnt Fuel to Air Ratio, FARU). Επιπρόσθετα, η συνιστώσα Burner Emissions εκτιμά το επίπεδο εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x), μονοξειδίου του άνθρακα (CO), άκαυστων υδρογονανθράκων (UHC) και αιθάλης μέσω ημιεμπειρικών σχέσεων. Οι δύο αυτές συνιστώσες μπορούν και να χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωση που χρησιμοποιούνται στους στρατιωτικούς αναθερμαντήρων (reheat pipes) στροβιλοαντιδραστήρες όπως και θαλάμους καύσης άλλων ειδών που χρησιμοποιούνται σε διατάξεις αεριοστροβίλων.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα εξεταστεί μόνο η συνιστώσα **Burner**. Προφανώς ό,τι αναφερθεί για αυτή ισχύει και για την **Burner_Emissions** καθώς ο κώδικας που περιγράφει τη λειτουργία των δύο αυτών συνιστωσών είναι ίδιος με μόνη διαφορά τις ημιεμπειρικές σχέσεις που περιέχονται στη συνιστώσα Burner_Emissions. Η συνιστώσα **Burner** έχει πέντε θύρες, οι οποίες περιγράφονται στον Πίνακας 3.3. Δύο από αυτές αφορούν το εργαζόμενο μέσο στην είσοδο και την έξοδο, μια αφορά την παροχή καυσίμου και οι υπόλοιπες δύο είναι Info θύρες και περιέχουν πληροφορίες για την παροχή καυσίμου και την κατώτερη θερμογόνο δύναμη (Lower Heating Value, LHV). Οι μεταβλητές που χρησιμοποιούνται στον κώδικα του θαλάμου κάυσης περιγράφονται στον Πίνακας 3.4 και το Σχήμα 3.1 αποτελεί ένα διάγραμμα ροής αυτών.

	Όνομα Θύρας	Τύπος	Κατεύθυνση
1	F_in	Εργ. Μεσου (fluid)	In
2	F_out	Εργ. Μέσου (fluid)	Out
3	Fu_in	Καυσίμου (fuel)	In
4	WfInj	Info	Out
5	FuelLHV	Info	Out

Πίνακας 3.3: Θύρες (Ports) συνιστώσας Θαλάμου Καύσης

	Оνоμа	Τύπος	Τιμή	Περιγραφή
		Fluid Tab		
1	fluid_in	Enumeration	Default	Μοντέλο εργαζόμενου
				μέσου
2	FluidModelFile	Enumeration	DefaultFluidModelFile	
3	FluidModelPath	Filepath		Διεύθυνση μοντέλου
				εργαζόμενου μέσου
		Efficiency Tab		
4	switcheffb	Enumeration	INPUTeff	Τρόπος υπολογισμού
				βαθμού απόδοσης
				θαλάμου καύσης
5	Eff_in	REAL	0.9995	Βαθμός απόδοσης
				θαλάμου καύσης
6	omegaDes	REAL	1	Φόρτιση θαλάμου
				καύσης στο σημείο
				σχεδίασης
7	partLoadConst	REAL	1.6	Σταθερά φόρτισης
				θαλάμου καύσης
		Fuel Tab		
8	switchFuelPnTValues	Enumeration	fromData	
9	Pfu_Inj	REAL	101325	Πίεση εγχυόμενου
				καυσίμου
10	Tfu_inj	REAL	288.15	Θερμοκρασία
				εγχυόμενου καυσίμου
11	JetAhfu_T	TABLE1D		
12	JP4hfu_T	TABLE1D		
13	Dieselhfu_T	TABLE1D		
14	Hydrogenhfu_T	TABLE1D		
15	NaturalGashfu_T	TABLE1D		
16	Customshfu_T	TABLE1D		
17	LHVcustom	REAL	43124*10 ³ J/kg	
		Drop Tab	Pressure	
18	switchdPqPb	Enumeration	INPUTdPqP	
19	dPqP_in	REAL	0	Απώλειες πίεσης
20	Kcold	REAL	0	Απώλειες πίεσης ψυχρού
				ρεύματος
21	Khot	REAL	0	Απώλειες πίεσης θερμού
				ρεύματος
22	WqndDes	REAL	1	Ανηγμένη παροχή
				σημείο σχεδίασης στην

				είσοδο του θαλάμου
				καύσης
		Geometry	Tab	
23	Ae_in	REAL	1	Ενεργή επιφάνεια εισόδου (m ²)
24	GeoAm	REAL	1	Μέγιστη διατομή (m ²)

Πίνακας 3.4: Μεταβλητές Θαλάμου Καύσης



Σχήμα 3.1: Διάγραμμα ροής μεταβλητών συνιστώσας Θαλάμου Καύσης

Η μεταβλητή **fluid_in** καθορίζει ποιο μοντέλο εργαζόμενου μέσου θα χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του μαθηματικού μοντέλου. Εφόσον έχει την τιμή 'Default' τότε το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου καθορίζεται από την συνιστώσα 'General'. Σε αντίθετη περίπτωση ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να καθορίσει το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου από τις τιμές του Πίνακας 3.5:

	Μοντέλο εργαζόμενου μέσου	Περιγραφή
1	JetA_noDiss	Jet-A με σταθερή σύσταση προϊόντων της καύσης
2	JP4_noDiss	JP4 με σταθερή σύσταση προϊόντων της καύσης
3	Diesel_noDiss	Diesel με σταθερή σύσταση προϊόντων της
		καύσης
4	Hydrogen_noDiss	Υδρογόνο με σταθερή σύσταση προϊόντων της
		καύσης
5	NaturalGas_noDiss	Φυσικό Αέριο με σταθερή σύσταση προϊόντων της
		καύσης
6	JetA_Wnf	Jet-A μέσω πολυωνύμων
7	CustomFluidModel	

Πίνακας 3.5: Επιλογές μοντέλων εργαζόμενου μέσου

Μέσω της μεταβλητής switcheffb καθορίζεται ποιά μέθοδος θα εφαρμοστεί για τον υπολογισμό του βαθμού απόδοσης της καύσης που ορίζεται από την ακόλουθη σχέση

$$eff = \frac{Wf_{burned}}{Wf_{injected}}$$
(3.5)

όπου:

eff: Ο βαθμός απόδοσης του Θαλάμου Καύσης

 $W\!f_{burned}$ Η παροχή και
όμενου καυσίμου

Wfinjected: Η παροχή εγχυόμενου καυσίμου

Ο βαθμός απόδοσης του θαλάμου καύσης είναι από τις πιο σημαντικές σχεδιαστικές παραμέτρους, αφού σύμφωνα με τον ενεργειακό ισολογισμό, επηρεάζει την ποσότητα του καυσίμου που απαιτείται για την επίτευξη μιας δεδομένης αύξησης της θερμοκρασίας. Εκτός αυτού επηρεάζει και την σύσταση των καυσαερίων. Η εξίσωση του ενεργειακού ισολογισμού χρησιμοποιείται για να υπολογίσει την αύξηση της θερμοκρασίας για δεδομένες συνθήκες εισόδου και παροχής καυσίμου ή την ποσότητα καυσίμου που απαιτείται για ορισμένη αύξηση της θερμοκρασίας στην έξοδο του θαλάμου καύσης. Η εξίσωση αυτή παρατίθεται παρακάτω:

$$W_{out} \cdot (hg_{t,out} - hg_{t,r}) = W_{in} \cdot (ha_{t,in} - ha_{t,r}) + W_f \cdot LHV \cdot eff + W_f \cdot (hf_t - hf_r)$$
(3.6)

όπου:

 W_{out} : Παροχή στην έξοδο του θαλάμου καύσης (kg/sec)

hg_{t,out},hg_{t,r} :Ενθαλπία καυσαερίων στη θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης και σε θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα (J/kg)

 W_{in} : Παροχή αέρα στην είσοδο του θαλάμου καύσης (kg/sec)

 $h_{a,in},h_{a,r}$: Ενθαλπία αέρα στη θερμοκρασία είσοδο στο θάλαμο καύσης και στη θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα (J/kg)

W_f :Παροχή καυσίμου (kg/sec)

LHV : Κατώτερη θερμογόνος δύναμη καυσίμου (J/kg)

eff : Βαθμός απόδοσης θαλάμου καύσης

hft ,hfr : Ενθαλπία καυσίμου στη θερμοκρασία έγχυσης και θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα (J/kg)

Ο βαθμός απόδοσης του θαλάμου καύσης υπολογίζεται μέσω μιας από τις μεθόδους του Πίνακας 3.6 ανάλογα με την τιμή της μεταβλητής **switcheffb**

	Τιμή της switcheffb	Περιγραφή
1	INPUTeff	Ο βαθμός απόδοσης καθορίζεται από το χρήστη
2	CUSTOMeff	Δεν είναι διαθέσιμο
3	MAPeff	Ο βαθμός απόδοσης καθορίζεται από χάρτες (δεν
		περιλαμβάνεται στην παρούσα έκδοση του PROOSIS)

Πίνακας 3.6: Τιμές της μεταβλητής switcheffb που καθορίζει τον τρόπο υπολογισμού του βαθμού απόδοσης καύσης.

Σε περίπτωση επιλογής της τιμής **INPUTeff** χρησιμοποιείται ως βαθμός απόδοσης η τιμή της μεταβλητής **eff_in.** Αν επιλεγεί η τιμή CUSTOMeff ο βαθμός απόδοσης του θαλάμου καύσης λαμβάνεται από την ακόλουθη εξίσωση:

$$eff = 1 - e^{\log(1 - eff_{des}) + K \cdot \left(\frac{\Omega}{\Omega_{des}}\right)}$$
(3.7)

όπου

eff_{des}: βαθμός απόδοσης θαλάμου καύσης στο σημείο σχεδίασης

Κ: Σταθερά φόρτιση θαλάμου καύσης (με τιμές που κυμαίνονται από 1-2)

Ω: Φόρτιση θαλάμου καύσης

 Ω_{des} : Φόρτιση θαλάμου καύσης στο σημείο σχεδίασης

Η παράμετρος φόρτισης του θαλάμου καύσης προκύπτει από την εξίσωση:

$$\Omega = \frac{W_{in}}{P_{in}^{1.8} \cdot 10^{0.00145 \cdot (T_{in} - 400)}}$$
(3.8)

Ο βαθμός απόδοσης θαλάμου καύσης στο σημείο σχεδίασης (eff_{des}), η φόρτιση του θαλάμου καύσης (Ω) και η σταθερά φόρτισης (Κ) είναι δεδομένα εισόδου τα οποία δίδονται ως τιμές των μεταβλητών eff_in, omegaDes και partloadConst αντίστοιχα.

Η κατώτερη θερμογόνος δύναμη (LHV) που χρησιμοποιείται στον ενεργειακό ισολογισμό στο θάλαμο καύσης εξαρτάται από το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να εισάγει μια τιμή για τη μεταβλητή LHVcustom.

Η ισχύς που σχετίζεται με την αισθητή μεταβολή της ενθαλπίας του καυσίμου εξαρτάται από τη διαφορά θερμοκρασίας του εγχυόμενου καυσίμου και της θερμοκρασίας αναφοράς (288K).Η πίεση και η θερμοκρασία έγχυσης του καυσίμου δίνονται είτε ως δεδομένα στις μεταβλητές **Pfu_Inj** και **Tfu_Inj** αντίστοιχα ή μέσω τις θύρας μέσω αντίστοιχων μεταβλητών.

Η αισθητή μεταβολή της ενθαλπίας του καυσίμου λαμβάνεται από μονοδιάστατους πίνακες. Σε περίπτωση επιλογής καυσίμου που δεν υπάρχει στη βιβλιοθήκη ο χρήστης πρέπει να δημιουργήσει μόνος του έναν αντίστοιχο πίνακα.

Η πίεση στην έξοδο του θαλάμου καύσης υπολογίζεται με τη βοήθεια της παρακάτω εξίσωσης:

$$P_{t,out} = (1 - dPqP) \cdot P_{t,in} \tag{3.9}$$

όπου ο όρος απώλειας πίεσης dPqP ορίζεται ως: $dPqP = \frac{P_{t,in} - P_{t,out}}{P_{t,in}}$

Γενικά οι απώλειες πίεσης στο θάλαμο καύσης οφείλονται σε δύο αιτίες, την τριβή της ροής και την τύρβη μέσα στο θάλαμο καύσης και στην αύξηση της θερμοκρασίας. Αυτές οι απώλειες αναπαριστώνται από τους συντελεστές Kcold και Khot αντίστοιχα.

Η μεταβλητή switchdPqPb μπορεί να λάβει μια από τις τιμές που περιέχονται στον Πίνακας 3.7:

	Τιμή switchdPqPb	Περιγραφή
1	INPUTdPqP	Οι απώλειες πίεσης ορίζονται από το χρήστη
2	CALCULATEdPqP	Οι απώλειες πίεσης καθορίζονται από τους συντελεστές
		Kcold και Khot
3	CUSTOMdPqP	
4	MAPdPqP	Οι απώλειες πίεσης λαμβάνονται από χάρτες (δεν
		περιλαμβάνεται στην παρούσα έκδοση του PROOSIS)

Πίνακας 3.7: Τιμές μεταβλητής switchdPqPb

Η επιλογή **INPUTdPqP** αποτελεί την απλούστερη μέθοδο υπολογισμού των απωλειών πίεσης. Τυπικές τιμές για αεροπορικούς κινητήρες είναι 3-7% και για βιομηχανικούς αεριοστροβίλους 2%. Με την επιλογή **CALCULATEdPqP** οι απώλειες πίεσης υπολογίζονται μέσω των συντελεστών Kcold και Khot με την ακόλουθη σχέση:

$$dPqP = \left[\frac{W_{in}^2}{2 \cdot \rho_{in} \cdot GeomAm^2 P_{t,in}}\right] \times \left[Kcold + Khot\left(\frac{T_{t,out}}{T_{t,in}} - 1\right)\right]$$
(3.10)

Στην παραπάνω σχέση η πυκνότητα του αέρα (pin) υπολογίζεται για τις συνθήκες εισόδου στο θάλαμο καύσης μέσω της ενεργής επιφάνειας η οποία δίδεται ως τιμή στη μεταβλητή **Ae_in** ενώ οι παράμετροι GeomAm,Kcold και Khot είναι δεδομένα εισόδου. Οι απώλειες ψυχρού ρεύματος εκφράζονται από τη σχέση:

$$Kcold = \frac{dPqPCold}{\left(\frac{W_{in} \times \sqrt{T_{t,in}}}{P_{in}}\right)^2}$$
(3.11)

όπου dPqPCold οι ψυχρές απώλειες πίεσης.

Οι θερμές απώλειες ρεύματος εκφράζονται από τη σχέση:

$$Khot = \frac{dPqPHot}{\left(\frac{T_{t,out}}{T_{t,in}} - 1\right) \times \left(\frac{W_{in} \times \sqrt{T_{t,in}}}{P_{t,in}}\right)^2}$$
(3.12)

όπου dPqPHot οι θερμές απώλειες πίεσης.

Με την επιλογή CUSTOMdPq οι απώλειες πίεσης σχετίζονται με τις απώλειες πίεσης στο σημείο σχεδίασης.

$$dPqP = dPqP _ in \cdot \left(\frac{W_{qnd}}{W_{qndDes}}\right)^2$$
(3.13)

όπου η ανηγμένη παροχή Wqnd υπολογίζεται από την ακόλουθη σχέση:

$$Wqnd = \frac{W_{in} \cdot \sqrt{T_{t,in}}}{P_{t,in}}$$
(3.14)

Για τον υπολογισμό των απωλειών πίεσης με αυτόν τον τρόπο ο χρήστης πρέπει να εισάγει τις αντίστοιχες τιμές των μεγεθών **WqndDes** και **dPqP_in** στην αρχική καρτέλα με τις ιδιότητες του θαλάμου καύσης.

3.4 Αντικατάσταση του μοντέλου εργαζόμενου μέσου

Με την εισαγωγή του CEA στο PROOSIS και την εκτέλεση του εσωτερικά ο χρήστης δεν θα χρειάζεται πλέον να εκτελεί το CEA εξωτερικά, να δημιουργεί τα αρχεία xml και μετά να τα εισάγει αυτά στο PROOSIS. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται για κάθε τιμή της πίεσης, και για διαφορετική θεώρηση της χημικής διάστασης. Αντίθετα ο χρήστης μπορεί να εκτελέσει το CEA εσωτερικά, για οποιαδήποτε πίεση και διάσταση προϊόντων της καύσης χωρίς να χρειαστεί να ακολουθήσει αυτή τη χρονοβόρα διαδικασία και επιπλέον τα αποτελέσματα που θα λαμβάνει θα είναι ακριβέστερα διότι δεν θα προκύπτουν από γραμμικές παρεμβολές στα μεγέθη του μοντέλου εργαζόμενου μέσου.<u>Για την αντικατάσταση του εργαζόμενου μέσου για τους λόγους που</u> <u>προαναφέρθηκαν απαιτείται:</u>

- Τροποποίηση του κώδικα Fortran και εισαγωγή του στο PROOSIS
- Τροποποίηση βιβλιοθηκών funcstherm και funcsfluid
- Αλλαγή κώδικα θαλάμου καύσης

3.4.1 Τροποποίηση κώδικα Fortran

Για να εισαχθεί ο κώδικας του CEA στο PROOSIS έγιναν ορισμένες αλλαγές όσον αφορά στις μονάδες μέτρησης των μεγεθών. Στο tp πρόβλημα αυτός εκτελείται ουσιαστικά δυο φορές, μια την επιθυμητή θερμοκρασία και μια για θερμοκρασία αναφοράς (298.15 K) έτσι ώστε η τιμή της ενθαλπίας που προκύπτει είναι η διαφορά της απόλυτης ενθαλπίας από την ενθαλπία αναφοράς. Επιπλέον η σταθερά των αερίων R διαιρείται με το μοριακό βάρος και η δυναμική συνεκτικότητα μετατρέπεται σε Pa*sec από millipoise. Οι παραπάνω αλλαγές στα μεγέθη γίνονται ώστε να είναι αντίστοιχα με αυτά που προκύπτουν από τους πίνακες xml, όπως περιγράφηκε παραπάνω.

Το PROOSIS δεν υποστηρίζει μεταβλητές Character. Γι αυτό το λόγο η αγνόηση στοιχείων για τη χημική ισορροπία έχει περιοριστεί μόνο στην επιλογή αγνόησης ή όχι του συμπυκνωμένου νερού.

Η επιτυχής αντικατάσταση του μοντέλου εργαζόμενου μέσου προϋποθέτει την ισοδυναμία των τιμών των αποτελεσμάτων του τροποποιημένου κώδικα με τις τιμές των πινάκων xml των μοντέλων εργαζόμενου μέσου όπως επίσης και την ισοδυναμία των συναρτήσεων.

3.4.2 Σύγκριση αποτελεσμάτων κώδικα με τους πίνακες xml.

Για να εξακριβωθεί η συμβατότητα του κώδικα με τους xml πίνακες έγιναν δοκιμές για Jet-A(L) για θερμοκρασίες 500,1000 και 1500 K, λόγο αέρα καυσίμου 0 και 0.02 και λόγο νερού αέρα 0 και 0.1, για σταθερή σύσταση των προϊόντων της καύσης (no dissociation). Τα μεγέθη που προκύπτουν συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα μεγέθη των xml πινάκων. Προφανώς συγκρίθηκαν μόνο τα μεγέθη της ενθαλπίας (h), της εντροπίας (phi), της δυναμικής συνεκτικότητας (mu) και του ισεντροπικού εκθέτη γ, καθώς ένα μοντέλο εργαζόμενου μέσου σε πίνακες xml. περιέχει μόνο αυτά τα μεγέθη.

Στον Πίνακας 3.8 παρατίθενται ενδεικτικά δύο συγκρίσεις μετρήσεων του πίνακα xml και του τροποποιημένου κώδικα του CEA με το σχετικό σφάλμα επί τοις εκατό.

T=1000K,far=0.02 , war=0	Tιμή xml	Τιμή κώδικα	Σφάλμα %
Ειδική ενθαλπία h (J/kg)	768000	767999	0,0001302
Συνάρτηση εντροπίας φ (J/kgK)	8,2286	8,2285	0,0012153
Ισεντροπικός εκθέτης γ	1,3221	1,322	0,0075643
Δυναμική συνεκτικότητα μ (Pa*sec)	4,3650E-05	4,3651E-05	-0,0022909
Σταθερά αερίου R (J/kgK)	287,017	287,027	-0,003484
T=500K,far=0 , war=0.1			
Ειδική ενθαλπία h (J/kg)	221130	221126	0,0018089
Συνάρτηση εντροπίας φ (J/kgK)	7,8806	7,8806	0
Ισεντροπικός εκθέτης γ	1,3736	1,3736	0
Δυναμική συνεκτικότητα μ (Pa*sec)	2,7230E-05	2,7231E-05	-0,0036723
Σταθερά αερίου R (J/kgK)	302,911	302,914	-0,0009904

Πίνακας 3.8: Σχετικά σφάλματα μεταξύ τιμών κώδικα και πινάκων xml.

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι αρκετά ικανοποιητικά, τα σφάλματα είναι ελάχιστα οπότε μπορεί να επιβεβαιωθεί ότι ο κώδικας και οι πίνακες xml εξάγουν τα ίδια αποτελέσματα. Όπως έχει αναφερθεί και σε προηγούμενη επιβεβαίωση του κώδικα, τυχόν σφάλματα προκύπτουν από στρογγυλοποιήσεις του εκάστοτε προγράμματος. Επίσης μικρής σημασίας σφάλματα οφείλονται από τη θεώρηση του R ως 8.314 στους πίνακες xml και 8.3145 στον κώδικα και στη στρογγυλοποιημένη κατά μάζα σύσταση του νερού στις περιπτώσεις όπου ο λόγος νερού- αέρα είναι μη μηδενικός (για war=0.1 προκύπτει 0.091 στους πίνακες xml.). Επομένως ο κώδικας μπορεί να υποκαταστήσει του πίνακες xml των μοντέλων εργαζόμενου μέσου χωρίς σφάλματα.

3.4.3 Δημιουργία βιβλιοθήκης και αλλαγή μοντέλου εργαζόμενου μέσου

Μετά την επιβεβαίωση του, ο κώδικας μπορεί να εισαχθεί στο PROOSIS με τη μορφή βιβλιοθήκης.

Στο PROOSIS οι συναρτήσεις είναι τριών ειδών, συναρτήσεις σε γλώσσα EL, συναρτήσεις σε άλλη γλώσσα (όπως Fortran, C ή C++) ή ήδη ενσωματωμένες (built in) συναρτήσεις οι οποίες είτε σχετίζονται με τη μοντελοποίηση και την προσομοίωση (όπως διαχείριση αρχείων, μεταβλητών, πειραμάτων) είτε με μαθηματικές εξισώσεις (π.χ τριγωνομετρικές, λογαριθμικές). Στη συγκεκριμένη περίπτωση η συνάρτηση θα είναι προφανώς της δεύτερης κατηγορίας.

Η βιβλιοθήκη αυτή δημιουργείται ως εξής: Από τον κώδικα αυτό δημιουργείται μια static library με το όνομα TURBOCEA.lib . Αυτή μεταφέρεται στο φάκελο του PROOSIS που αφορά τη βιβλιοθήκη στην οποία θα εφαρμοστεί ο κώδικας και στον υποφάκελο 'lib' μαζί με τις βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib . Στον υποφάκελο win32_vc6 αντιγράφεται η TURBOCEA.lib. Οι βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib μεταφέρονται και στον φάκελο 'bin' της διεύθυνσης του PROOSIS.

Η βιβλιοθήκη που δημιουργήθηκε μπορεί να αναγνωριστεί από το πρόγραμμα μετά από την δήλωση των διανυσμάτων εισόδου και εξόδου, του ονόματος του προγράμματος και το όνομα της βιβλιοθήκης στην οποία ανήκουν τα διανύσματα αυτά όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.2. Η διαδικασία αυτή ακολουθείται για οποιαδήποτε βιβλιοθήκη που πρέπει να αναγνωριστεί από το PROOSIS. Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι δεν αναγνωρίζονται μεταβλητές με χαρακτήρες.

```
"FORTRAN" FUNCTION NO_TYPE CEAPRO
(
IN INTEGER ibase[],
IN REAL expdat[],
IN REAL dayco[],
IN REAL fuelvec1[],
OUT REAL fuelvec1[],
OUT REAL ProdProps[]
) IN "TURBOCEA.lib"
```

Σχήμα 3.2: Κώδικας για αναγνώριση της βιβλιοθήκης του CEA από το PROOSIS

Παρατηρείται ότι έχουν δηλωθεί όλα τα διανύσματα εισόδου και εξόδου του τροποποιημένου κώδικα όπως περιγράφηκε στην υποπαράγραφο 3.4.1 όπως επίσης το τι είδους αριθμούς περιέχουν αυτά (ακέραιους ή πραγματικούς).

3.4.4 Αντικατάσταση του υπάρχοντος μοντέλου εργαζόμενου μέσου

Αφού εισαχθεί η βιβλιοθήκη στο PROOSIS μπορεί να δημιουργηθεί μια συνάρτηση (σε γλώσσα EL) που χρησιμοποιεί στοιχεία από τη βιβλιοθήκη αυτή.Μια συνάρτηση σε γλώσσα EL πρέπει να περιέχει τουλάχιστον τα ακόλουθα στοιχεία:

Για να δημιουργηθεί μια συνάρτηση σε γλώσσα EL αρχικά ορίζεται το όνομα της νέας συνάρτησης το οποίο πρέπει να είναι το μοναδικό στη βιβλιοθήκη που αυτή βρίσκεται. Ο χρήστης εισάγει εκεί και τα ορίσματα εισόδου και εξόδου. Στη συνέχεια στο μπλοκ DECLS δηλώνονται τοπικές μεταβλητές του κώδικα. Στη συνέχεια στο μπλοκ BODY περιέχονται όλοι οι υπολογισμοί του κυρίως προγράμματος όπως ορισμοί μεταβλητών, βρόχοι WHILE και FOR, IF-THEN ELSE δηλώσεις, ASSERT και RETURN εκφράσεις ή κλήσεις άλλων συναρτήσεων.

Σκοπός της αντικατάστασης του εργαζόμενου μέσου είναι η εξάλειψη των εγγενών μειονεκτημάτων του. Η βελτίωση του υπάρχοντος εργαζόμενου μέσου συνίσταται στην εισαγωγή της πίεσης ως όρισμα εισόδου, στην εισαγωγή της χημικής διάστασης και στη μη ανάγκη δημιουργίας νέου μοντέλου στην περίπτωση αλλαγής του καυσίμου.

Οι νέες συναρτήσεις που θα αντικαταστήσουν τις συναρτήσεις των βιβλιοθηκών funcstherm και funcsfluid θα καλούν τη νέα βιβλιοθήκη που θα υλοποιεί τον κώδικα. Τα μεγέθη που θα προκύπτουν θα είναι πλέον συνάρτηση των ακόλουθων παραμέτρων:

- Λόγος νερού καυσίμου (war)
- Θερμοκρασία ή ο λογάριθμος της θερμοκρασίας (για τον υπολογισμό της συνάρτησης εντροπίας)
- Λόγος αέρα καυσίμου (far)
- Πίεση

Παρατηρείται ότι όλα τα μεγέθη που περιέχονται στην funcsfluid (δηλαδή ειδική ενθαλπία, ισεντροπικός εκθέτης, σταθερά αερίου, συνάρτηση εντροπίας και δυναμική συνεκτικότητα) περιέχονται στο διάνυσμα εξόδου Prodprops του νέου κώδικα. Εφόσον λοιπόν η νέα βιβλιοθήκη εξάγει τα επιθυμητά θερμοδυναμικά μεγέθη και στις κατάλληλες μονάδες μέτρησης, δεν απαιτούνται περαιτέρω υπολογισμοί.

Για την αντικατάσταση των πέντε συναρτήσεων του Πίνακας 3.1 ακολουθείται η εξής δομή:

- Ορίζεται το όνομα της συνάρτησης
- Δηλώνονται τα ορίσματα εισόδου (DECLS), δηλαδή θερμοκρασία, πίεση, λόγος αέρα καυσίμου και λόγος νερού αέρα
- Όπως γίνεται και παραπάνω εισάγονται τα υπόλοιπα δεδομένα (BODY)
- Καλείται ο κώδικας CEA (στην προκειμένη περίπτωση ονομάζεται CEAPRO)
- Ζητείται από τη συνάρτηση να επιστρέψει μόνο το ζητούμενο δεδομένο (από το διάνυσμα εξόδου Prodprops με χρήση εντολής RETURN

Για τις αντίστροφες συναρτήσεις T_h και T_phi της funcsfluid δημιουργούνται οι συναρτήσεις CEA_T_h και CEA_T_phi. Για να λειτουργήσουν αυτές χρειάζεται κάποια επαναληπτική διαδικασία εύρεσης ρίζας μιας συνάρτησης. Γι αυτό το λόγο δημιουργείται μια συνάρτηση με βάση τη μέθοδο της τέμνουσας όπως η συνάρτηση zreal η οποία περιέχεται στη funcsfluid. Στο νέο αρχείο δημιουργούνται και δύο

συναρτήσεις με βάση τις συναρτήσεις Std_T_h και Std_T_phi. Η διαδικασία που ακολουθείται για την υλοποίηση των συναρτήσεων αυτών είναι ίδια με τις προηγούμενες πέντε εξισώσεις.

Στο Παράρτημα 2 παρατίθεται ενδεικτικά μια τέτοια συνάρτηση σε γλώσσα EL. Για τις συναρτήσεις που περιέχονται στη βιβλιοθήκη funcstherm εφαρμόζεται παρόμοια διαδικασία. Έτσι, έχουν αντικατασταθεί όλες οι βασικές εξισώσεις που χρησιμοποιούν το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου.

Στην επόμενη ενότητα θα περιγραφεί πως δημιουργείται ένα μοντέλο προσομοίωσης θαλάμου καύσης και στη συνέχεια οι τρόποι με τους οποίους χρησιμοποιείται αυτό για να αποδειχτεί η ορθότητα του νέου μοντέλου εργαζόμενου μέσου και εντοπίζονται τα σημεία εκείνα που εξαρτώνται από το εκάστοτε μοντέλο.

3.4.5 Μοντελοποίηση Θαλάμου Καύσης

Για τη δημιουργία μοντέλου θαλάμου καύσης, και γενικά οποιουδήποτε μοντέλου που ενδέχεται να αποτελείται από μία συνιστώσα ή να προσομοιώνει τη λειτουργία ενός έναν ολόκληρο κινητήρα, η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής:

- 1. Δημιουργία του σχήματος (Schematic) χρησιμοποιώντας τα κατάλληλα σύμβολα.
- 2. Δημιουργία **Partition**
- 3. Διαμόρφωση του κατάλληλου Experiment
- 4. Προαιρετικά εκτέλεση της προσομοίωσης στο Monitor

Στην προκειμένη περίπτωση δημιουργείται ένα Schematic με τις συνιστώσες General και Burner, οι οποίες βρίσκονται στη βιβλιοθήκη Turbo. Από τις επιλογές σε αυτές τις δύο συνιστώσες καθορίζεται και το είδος του καυσίμου (στην προκειμένη περίπτωση Jet-A(L)) που χρησιμοποιείται στη μοντελοποίηση. Αφού γίνει το compilation ορίζεται το **Partition** με τις ακόλουθες συνθήκες του Πίνακας 3.9.

Όνομα μεταβλητής	Περιγραφή
Brn.F_in.Ang	Γωνία ροής
Brn.F_in.FARB	Λόγος αέρα καυσίμου στην είσοδο του Θ.Κ
Brn.F_in.FARU	Λόγος άκαυστου καυσίμου αέρα στην είσοδο του Θ.Κ.
Brn.F_in.Pt	Ολική πίεση (Pa)
Brn.F_in.Tt	Ολική θερμοκρασία (Κ)
Brn.F_in.W	Παροχή μάζας αέρα (kg/s)
Brn.F_in.WAR	Λόγος νερού αέρα
Brn.Fu_in.W	Παροχή μάζας καυσίμου (kg/s)

Πίνακας 3.9: Οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν στην προσομοίωση

Τα μεγέθη αυτά έχουν επιλεγεί έτσι ώστε να έχουν μεγαλύτερη ομοιότητα με τα στοιχεία που χρειάζεται ο κώδικας. Ο λόγος καυσίμου αέρα (far) είναι ο λόγος παροχής καυσίμου προς παροχή αέρα.

Αυτές οι οριακές συνθήκες καθορίζουν το μαθηματικό μοντέλο που θα χρησιμοποιηθεί. Έτσι, στο πείραμα που θα δημιουργηθεί δίνονται τιμές σε αυτές. Για μεγαλύτερη ευκολία από το wizard επιλέγεται να δημιουργηθεί και αρχείο EL με τις μεταβλητές του πειράματος ώστε σε ενδεχόμενη επανεκτέλεση του πειράματος με άλλα δεδομένα να μην χρειαστεί να επαναληφθεί η διαδικασία μέσω wizard. Σε αυτό το αρχείο EL, προστίθεται και κώδικας που καλεί τη νέα βιβλιοθήκη, οπότε για μεγαλύτερη ευκολία τα δεδομένα εισόδου (δηλαδή τα ορίσματα που περιγράφηκαν στην υποπαράγραφο 2.3.1 εισάγονται εκεί).

Στη συνέχεια με βάση αυτό το πείραμα ελέγχεται η ορθότητα του νέου μοντέλου εργαζόμενου μέσου με δύο τρόπους:

Αρχικά εντοπίζονται οι συναρτήσεις του κώδικα του θαλάμου καύσης (Burner.el ο οποίος βρίσκεται στη βιβλιοθήκη Turbo) οι οποίες εξαρτώνται από το εκάστοτε μοντέλο εργαζόμενου μέσου. Η αλλαγή του μοντέλου εργαζόμενου μέσου, επιφέρει αλλαγές μόνο στις παραμέτρους οι οποίες εξαρτώνται από αυτό.

- Η συνάρτηση therm_WTtPtAe (η οποία περιέχεται στη βιβλιοθήκη funcstherm)
- R_in (Σταθερά αερίου στην είσοδο του θαλάμου καύσης)
- ht_out (ενθαλπία καυσαερίου),
- ht_in (ενθαλπία αέρα στις συνθήκες εισόδου στο θάλαμο καύσης)

Οι παραπάνω συναρτήσεις λαμβάνουν τιμές από τις οριακές συνθήκες που έχουν καθοριστεί για το μοντέλο. Οι συναρτήσεις αυτές όμως αφού προκύπτουν από τις βιβλιοθήκες funcsfluid και funcstherm μπορούν να αντικατασταθούν από νέες. Στο πείραμα λοιπόν ελέγχεται η συμβατότητα των αποτελεσμάτων αυτών των συναρτήσεων με τα αποτελέσματα που εξάγονται από τις συναρτήσεις που περιέχονται στον κώδικα του θαλάμου καύσης και αφορούν το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου. Καθώς οι οριακές συνθήκες του μοντέλου έχουν καθοριστεί έτσι ώστε να είναι πανομοιότυπες με τα δεδομένα εισόδου της νέας βιβλιοθήκης και ο τρόπος προσδιορισμού είναι ισοδυναμία των αποτελεσμάτων. Μετά από επανεκτελέσεις σε διάφορες συνθήκες αυτό επιβεβαιώθηκε.

Έπειτα, επιχειρείται η εισαγωγή των νέων συναρτήσεων στον κώδικα του θαλάμου καύσης. Οι εξισώσεις που θα αλλάξουν με την αλλαγή του μοντέλου εργαζόμενου μέσου δεν αφορούν μόνο τον θάλαμο καύσης. Αφού δημιουργηθεί ο νέος θάλαμος καύσης, τα αποτελέσματα που δίνει θα είναι ακριβέστερα καθώς οι υπολογισμοί θα γίνονται με βάση τον νέο κώδικα και όχι τα προηγούμενα μοντέλα εργαζόμενου μέσου. Έτσι με παρόμοιο τρόπο εάν αλλάξουν και οι άλλες συνιστώσες τότε θα έχει βελτιωθεί σημαντικά η βιβλιοθήκη Turbo.

3.5 Χρόνοι εκτέλεσης πειράματος

Στην προσπάθεια για μείωση του χρόνου επεξεργασίας τροποποιήθηκε το αρχείο thermo.inp, με σκοπό τη μείωση μεγέθους της thermo.lib. Από τη βιβλιοθήκη σβήστηκαν τα στοιχεία που περιέχουν έστω ένα στοιχείο εκτός των C,H,S,O,N καθώς και των στοιχείων που απαρτίζουν τις ενώσεις στον ατμοσφαιρικό αέρα. Έτσι η βιβλιοθήκη μειώθηκε σε μέγεθος κατά 80%.

Για να προσδιοριστεί η επίδραση της αλαγής του μεγέθους της βιβλιοθήκης στο χρόνο εκτέλεσης του CEA, εκτελείται ο αλγόριθμος για τις δύο βιβλιοθήκες για συγκεκριμένες παροχές καυσίμου και αέρα μεταβάλλοντας τον βαθμό απόδοσης της καύσης από 80% - 100% και χρησιμοποιόντας την εξίσωση ισολογισμού ενέργειας του θαλάμου καύσης (3.6).

Ο Πίνακας 3.10 παρουσιάζει την ποσοστιαία απόκλιση του χρόνου που απαιτεί να υλοποιηθεί ο αλγόριθμος κάνοντας χρήση της νέας βιβλιοθήκης σε σχέση με την περίπτωση χρήσης της παλιάς βιβλιοθήκης. Όπως παρατηρούμε, παρουσιάζεται σημαντική μείωση του χρόνου υλοποίησης της τάξης του 44%.

	Εκατοστιαία απόκλιση	
eff	χρόνων	
1	-45,34883721	
0,98	-50,31847134	
0,96	-54,65116279	
0,94	-30,57324841	
0,92	-40,12738854	
0,9	-45,34883721	
0,88	-45,34883721	
0,86	-41,4893617	
0,84	-36,04651163	
0,82	-45,34883721	
0,8	-49,73262032	

Πίνακας 3.10: Χρόνοι εκτέλεσης πειράματος με την παλιά και νέα βιβλιοθήκη

3.6 Σύνοψη-Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάστηκε το λογισμικό PROOSIS και αναφέρθηκαν τα υπάρχοντα προβλήματα που προκύπτουν κατά την δημιουργία μοντέλων εργαζόμενου μέσου, τα οποία είναι:

- Η ανάγκη δημιουργίας νέου εργαζόμενου μέσου για κάθε νέα τιμή της πίεσης, άρα ακριβής μοντελοποίηση μόνο για μοντέλα πλήρους καύσης. Σε διαφορετική περίπτωση η αλλαγή της πίεσης επιφέρει αλλαγή και στη σύσταση των προϊόντων (αρχή Le Chatelier).
- Η ανάγκη εκτέλεσης ενός άλλου προγράμματος εξωτερικά για τη λήψη των πινάκων xml. Η διαδικασία αυτή προϋποθέτει τη γνώση του προγράμματος από το χρήστη και μπορεί να είναι χρονοβόρα και επίπονη.
- Η ανάγκη δημιουργίας νέου μοντέλου εργαζόμενου μέσου για κάθε καύσιμο.

Για την αντιμετώπιση αυτών των προβλημάτων ο τρόπος δημιουργίας μοντέλων εργαζόμενου μέσου αλλάχθηκε. Δημιουργήθηκε μια βιβλιοθήκη η οποία εκτελεί το CEA, με τις τροποποιήσεις που έχουν περιγραφεί στο προηγούμενο κεφάλαιο, για οποιοδήποτε καύσιμο και για οποιαδήποτε πίεση. Τα δεδομένα που λαμβάνει ο χρήστης από τη βιβλιοθήκη αυτή έγουν απόλυτη ταύτιση με τα δεδομένα από την εξωτερική εκτέλεση του CEA. Στη συνέχεια παρουσιάζεται ο τρόπος δημιουργίας ενός μοντέλου προσομοίωσης λειτουργίας ενός θαλάμου καύσης. Ένα μοντέλο με συγκεκριμένες οριακές συνθήκες συγκρίνεται με τη νέα βιβλιοθήκη όσον αφορά σε μεγέθη που εξαρτώνται από το μοντέλο του εργαζόμενου μέσου. Αφού επιβεβαιώνεται η ισοδυναμία μπορούν να αντικατασταθούν οι συναρτήσεις που εξαρτώνται από το υπάρχον μοντέλο εργαζόμενου μέσου με συναρτήσεις που χρησιμοποιούν το νέο μοντέλο. Αρχικά η τροποποίηση γίνεται μόνο για την συνιστώσα του θαλάμου καύσης Burner και οι υπόλοιπες συνιστώσες. Παρόμοιος τρόπος προσέγγισης χρησιμοποιείται και στο λογισμικό GasTurb στο οποίο το εργαζόμενο μέσο μοντελοποιείται στο θάλαμο καύσης με το μοντέλο της πλήρους διάστασης της καύσης και στα υπόλοιπα με το μοντέλο της σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης. Ο λόγος που γίνεται αυτό είναι ότι το όλο ενδιαφέρον επικεντρώνεται στην καύση, η οποία συντελείται στο θάλαμο καύσης. Παρόλα αυτά επειδή δεν αφορά μόνο το θάλαμο καύσης αλλά το σύνολο των συνιστωσών της βιβλιοθήκης Turbo, οι παραπάνω αλλαγές βελτιώνουν συνολικά τη βιβλιοθήκη.

Τέλος επιχειρήθηκε η μείωση του χρόνου επεξεργασίας μέσω μείωσης του μεγέθους της βιβλιοθήκης thermo.lib.Εγιναν μια σειρά από δοκιμές με την παλιά και την νέα thermo.lib και καταγράφηκε ο χρόνος επεξεργασίας. Η βιβιοθήκη μειώθηκε κατά 80% και ο χρόνος επεξεργασίας κατά 44% (Σε υπολογιστή Intel Celeron 2.8GHz και μνήμης 1.00GB).
4 Εφαρμογές νέου θαλάμου καύσης

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζονται εφαρμογές του προταθέντος θαλάμου καύσης (όπως αυτός περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 3), με σκοπό τον εντοπισμό των διαφορών σε σύγκριση με το αρχικό μοντέλο θαλάμου καύσης, καθώς επίσης και την πιστοποίηση της βελτιωμένης λειτουργικότητα του. Αρχικά προσομοίωνεται η λειτουργία του θαλάμου κάυσης ως μία και μόνη συνιστώσα, ενώ στη συνέχεια προσομοιώνεται η λειτουργία μιας μηχανής Turbojet η οποία περιέχει τη συνιστώσα αυτή.

4.1 Η νέα συνιστώσα θαλάμου καύσης

Ο νέος θάλαμος καύσης απαιτεί δεδομένα σχετικά με το καύσιμο που είναι απαραίτητα για την εκτέλεση του CEA και τα οποία αφορούν τη συνολική προσομοίωση της μηχανής και όχι μεμονωμένα το θάλαμο καύσης. Έτσι αυτά τα δεδομένα μπορούν να θεωρηθούν global μεταβλητές. Έτσι, μπορούν να δηλωθούν στον κώδικα common.el και στη συνέχεια να συμπεριληφθούν στον κώδικα της συνιστώσας General (general.el) με αποτέλεσμα τη δυνατότητα αλλαγής τους απευθείας από το Schematic. Γι αυτό το σκοπό στις επιλογές της συνιστώσας General δημιουργείται ένα νέο μενού επιλογών (tab) με τα δεδομένα που χρειάζεται να εισαχθούν. Στη συνέχεια τα ονόματα αυτών των μεταβλητών συνδέονται με τα αντίστοιχα στην βιβλιοθήκη funcsfluid, καθώς εκεί γίνεται η κλήση του CEA, και την οποια χρησιμοποιούν οι συναρτήσεις που σχετίζονται με το εργαζόμενο μέσο.

4.2 Προσομοίωση συνιστώσας θαλάμου καύσης

Σε αυτή την εφαρμογή προσομοιώνεται η λειτουργία του θαλάμου καύσης θεωρώντας τον αυτοτελή συνιστώσα. Η προσομοίωση της λειτουργίας πραγματοποιείται παραμετρικά για διάφορες παροχές καυσίμου Jet-A(L) τρείς φορές, μια για τον αρχικό θάλαμο καύσης, μια για το νέο θάλαμο καύσης για πλήρη καύση (no dissociation) και μία με διάσταση των προϊόντων της καύσης (dissociation).

Στο Partition του μοντέλου αυτού ορίζονται οι μεταβλητές οι οποίες αποτελούν και τις οριακές συνθήκες. Ο Πίνακας 4.1 περιέχει συγκεντρωτικά τις μεταβλητές και τις τιμές που λαμβάνουν στην συγκεκριμένη προσομοίωση:

Ονομα μεταβλητής	Περιγραφή	Τιμή μεταβλητής
Brn.F_in.Ang	Γωνία ροής	0
Brn.F_in.FARB	Λόγος αέρα καυσίμου στην είσοδο του Θ.Κ	0
Brn.F_in.FARU	Λόγος άκαυστου καυσίμου αέρα στην	0
	είσοδο του Θ.Κ.	
Brn.F_in.Pt	Ολική πίεση (Pa)	1.2*10 ⁵ Pa
Brn.F_in.Tt	Ολική θερμοκρασία (Κ)	600 K
Brn.F_in.W	Παροχή μάζας αέρα (kg/s)	50 kg/s
Brn.F_in.WAR	Λόγος νερού αέρα	0
Brn.Fu_in.W	Παροχή μάζας καυσίμου (kg/s)	0.5-2 kg/s

Πίνακας 4.1: Οριακές συνθήκες και οι αριθμητικές τιμές τους που χρησιμοποιήθηκαν στην προσομοίωση του θαλάμου καύσης.

Το Σχήμα 4.1 απεικονίζει τη θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης συναρτήσει της παροχής μάζας καυσίμου για α) τον αρχικό θάλαμο καύσης, β) το θάλαμο καύσης με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης (dissociation) και γ) με πλήρη καύση (no dissociation).



Σχήμα 4.1: Διάγραμμα θερμοκρασίας εξόδου από το θάλαμο καύσης συναρτήσει της παροχής μάζας καυσίμου

Από το σχήμα Σχήμα 4.1 παρατηρείται πως η καμπύλη της θερμοκρασίας εξόδου για τον αρχικό θάλαμο καύσης και για το νέο θάλαμο καύσης με πλήρη καύση σχεδόν ταυτίζονται, όπως ήταν αναμενόμενο. Όσον αφορά την απόκλιση που παρουσιάζει η καμπύλη του μοντέλο θαλάμου καύσης με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης σε σχέση με τις άλλες δύο περιπτώσεις, είναι απολύτως σύμφωνη με τη θεωρία καθώς στην περίπτωση πλήρους καύσης το καύσιμο αποδίδει πλήρως τη θερμογόνο δύναμη του, δηλαδή δεν απομένουν στα καυσαέρια συστατικά που θα μπορούσαν να καούν περισσότερο και να αποδώσουν επιπλέον θερμότητα με αποτέλεσμα η θερμοκρασία εξόδου να είναι μεγαλύτερη. Στη περίπτωση της διάστασης, δεσμεύεται θερμότητα από τα καυσαέρια για τη διάσταση των προϊόντων της καύσης με αποτέλεσμα την μικρότερη θερμοκρασία. Επίσης, όπως παρατηρείται, η απόκλιση αυτή αυξάνεται αυξανόμενης της παροχής μάζας του καυσίμου, γεγονός που προβλέπεται από την αρχή Le Chatelier επειδή τα φαινόμενα χημικής διάστασης γίνονται εντονότερα.

Αξίζει να σημειωθεί πως, ακόμα και στην περίπτωση μικρής παροχής καυσίμου και συνεπώς μικρής θερμοκρασίας εξόδου, η διαφορά μεταξύ της αγνόησης και του υπολογισμού της χημικής διάστασης είναι της τάξης του 2.5%. Ο Πίνακας 4.2 παρουσιάζει τις οι εκατοστιαίες αποκλίσεις μεταξύ των θερμοκρασιών εξόδου από το θάλαμο καύσης συναρτήσει της παροχής καυσίμου.

Παροχή	Εκατοστιαία	Εκατοστιαία
μάζας	απόκλιση	απόκλιση
καυσίμου	πλήρους	πλήρους
(kg/sec)	διάστασης	καύσης
0,5	2,56004681	0,00344976
0,65	3,00342013	0,00465631
0,8	3,36405769	0,0034923
0,95	3,66878085	-0,0001404
1,1	3,93501113	0,00204162
1,25	4,17445231	0,0064826
1,4	4,39509476	0,00961726
1,55	4,60256298	0,01118106
1,7	4,80099657	0,00901001
1,85	4,99370233	0,00541538
2	5,18376828	0,00083217

Πίνακας 4.2: Εκατοστιαίες αποκλίσεις της θερμοκρασίας εξόδου από το θάλαμο καύσης μεταξύ των μοντέλων πλήρους καύσης και πλήρους διάστασης από το αρχικό μοντέλο θαλάμου καύσης.

4.3 Προσομοίωση συνιστώσας μηχανής Turbojet

Σε αυτή την εφαρμογή προσομοιώνεται η λειτουργία μιας μηχανής turbojet στο σημείο σχεδίασης ώστε να προσδιοριστούν οι διαφορές που επιφέρουν οι διάφορες θεωρήσεις λειτουργίας του θαλάμου καύσης συνολικά σε επίπεδο μηχανής. Η προσομοίωση πραγματοποιείται παραμετρικά ως προς την παροχή καυσίμου, τρείς φορές (όπως και στην περίπτωση μόνο του θαλάμου καύσης), μια για τον αρχικό θάλαμο

καύσης, μια για το νέο θάλαμο καύσης για πλήρη καύση (no dissociation) και μία με διάσταση των προϊόντων της καύσης (dissociation).

Για τη δημιουργία του σχήματος (Schematic) που απεικονίζεται στο Σχήμα 4.2 χρησιμοποιούνται οι εξής συνιστώσες (components): Inlet (Αγωγός εισόδου) ,Compressor (συμπιεστής χωρίς χρήση χαρτών), Burner (θάλαμος καύσης), Turbine (στρόβιλος χρήση χαρτών), Nozzle (ακροφύσιο), Shaft (άξονας), Shaft end (άκρες αξόνων), General, Atmosphere (μοντέλο ατμόσφαιρας) και Perfmonitor.



Σχήμα 4.2: Μοντέλο μηχανής Turbojet

Τα μεγέθη στα οποία θα μελετηθεί η επίδραση του τρόπου μοντελοποίησης του θαλάμου καύσης είναι η θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης και η ειδική κατανάλωση καυσίμου (TSFC) η οποία υποδηλώνει το καιόμενο καύσιμο ανά μονάδα ώσης:

$$TSFC = \frac{\dot{m}_f}{F} \tag{4.1}$$

Όπου m_{f} : Η παροχή μάζας του καυσίμου (kg/sec)

F: Η ώση (kN)

Ο Πίνακας 4.3 παρουσιάζει τις οριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται στη συγκεκριμένη προσομοίωση καθώς και τις αριθμητικές τιμές που λαμβάνουν στο πείραμα (experiment).

Όνομα μεταβλητής	Περιγραφή	Τιμή μεταβλητής
Burner.Fu_in.W	Παροχή μάζας καυσίμου	0.5-2 kg/s
CompressorPR_cw	Λόγος πίεσης συμπιεστή	12
Compressor.eff	Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης	0.9
	συμπιεστή	
Compressor.heatP.Q	Ροή θερμότητας στο συμπιεστή	0
InletAtm.W_in	Παροχή αέρα στην είσοδο του	50 kg/s
	αγωγού εισόδου	
Turbine.eff	Ισεντροπικός βαθμός απόδοσης	0.9
	στροβίλου	
Turbine.heatP.Q	Ροή θερμότητας στο στρόβιλο	0
NozzleF_in.War	Λόγος νερού αέρα στην είσοδο του	0
	ακροφυσίου	
Turbine.PR_tw	Λόγος πίεσης στροβίλου	0.08

Πίνακας 4.3: Οριακές συνθήκες και τιμές μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν στην προσομοίωση μοντέλου μηχανής Turbojet

Στο Σχήμα **4.3** απεικονίζονται οι καμπύλες θερμοκρασίας εξόδου συναρτήσει της παροχής καύσιμου για τις περιπτώσεις του αρχικού θαλάμου καύσης, του νέου θαλάμου καύσης με πλήρη καύση και πλήρους διάστασης των προϊόντων της καύσης. Από το Σχήμα **4.3**, παρατηρείται πως η καμπύλη της θερμοκρασίας εξόδου για τον αρχικό θάλαμο καύσης και για το νέο θάλαμο καύσης με πλήρη καύση σχεδόν ταυτίζονται.



Σχήμα 4.3: Διάγραμμα θερμοκρασίας εξόδου από το θάλαμο καύσης συναρτήσει της παροχής μάζας καυσίμου

Επίσης, παρατηρείται απόκλιση μεταξύ της καμπύλης του μοντέλο θαλάμου καύσης με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης σε σχέση με τις άλλες δύο

περιπτώσεις. Τα συμπεράσματα αυτά ταυτίζονται με αυτά της εφαρμογής της αυτοτελούς προσομοίωσης του θαλάμου καύσης.

Στους πίνακες Πίνακας **4.4** και Πίνακας **4.5** απεικονίζονται οι εκατοστιαίες αποκλίσεις της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου και της θερμοκρασίας εξόδου του νέου θαλάμου καύσης με και χωρίς διάσταση των προϊόντων της καύσης σε σχέση με αυτές του αρχικού θαλάμου καύσης αντίστοιχα.

Παροχή μάζας	εκατοστιαία απόκλιση	εκατοστιαία απόκλιση
μαςας καυσίμου	πλήρους	πλήρους
(kg/sec)	διάστασης	καύσης
0,5	-2,670791	0,01811094
0,65	-3,1427883	0,0119919
0,8	-3,5252085	0,00987095
0,95	-3,8202522	0,00478019
1,1	-4,0823265	0,0063254
1,25	-4,3103389	0,0102832
1,4	-4,5300812	0,01279691
1,55	-4,7201142	0,01385003
1,7	-4,9003968	0,01292485
1,85	-5,0789048	0,00822478
2	-5,2540456	0,00258178

Πίνακας 4.4: Εκατοστιαίες αποκλίσεις της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου των μοντέλων πλήρους καύσης και πλήρους διάστασης από το αρχικό μοντέλο θαλάμου καύσης.

Παροχή μάζας	εκατοστιαία απόκλιση	εκατοστιαία απόκλιση
καυσίμου	πλήρους	πλήρους
(kg/sec)	διάστασης	καύσης
0,5	2,52732827	-0,0057293
0,65	2,97011459	-0,0109904
0,8	3,33166555	-0,0090209
0,95	3,63809306	-0,0044074
1,1	3,90647432	-0,0058175
1,25	4,14829067	-0,0094641
1,4	4,37142904	-0,0118839
1,55	4,58145007	-0,0128552
1,7	4,78248253	-0,0120493
1,85	4,97785952	-0,0076747
2	5,17074244	-0,0024146

Πίνακας 4.5: Εκατοστιαίες αποκλίσεις της θερμοκρασίας εξόδου από το θάλαμο καύσης μεταξύ των μοντέλων πλήρους καύσης και πλήρους διάστασης από το αρχικό μοντέλο θαλάμου καύσης.

Στο Σχήμα 4.4 απεικονίζονται οι καμπύλες ειδικής κατανάλωσης καυσίμου συναρτήσει της παροχής καύσιμου για τις περιπτώσεις του αρχικού θαλάμου καύσης, του νέου θαλάμου καύσης με πλήρη κάυση και πλήρους διάστασης των προιόντων της καύσης. Από το Σχήμα 4.4, παρατηρείται πως η καμπύλη της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για τον αρχικό θάλαμο καύσης και για το νέο θάλαμο καύσης με πλήρη καύση σχεδόν ταυτίζονται. Επίσης, παρατηρείται απόκλιση μεταξύ της καμπύλης του μοντέλου θαλάμου καύσης με πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης σε σχέση με τις άλλες δύο περιπτώσεις. Αυτό συμβαίνει επειδή η ειδική κατανάλωση καυσίμου εξαρτάται μόνο από την ώση (αφού η παροχή μάζας του καυσαερίου είναι ίδια στις δυο περιπτώσεις), η οποία εξαρτάται από την ταχύτητα των καυσαερίων που είναι η τετραγωνική ρίζα της διαφοράς της ολικής ενθαλπίας εισόδου στο ακροφύσιο με τη ενθαλπία εξόδου από το ακροφύσιο. Επειδή όμως η ενθαλπία εισόδου στο ακροφύσιο είναι η ταχύτητα εξόδου των καυσαερίων από το ακροφύσιο.





4.4 Σύνοψη-Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο ελέγχθηκε η λειτουργία της νέας συνιστώσας του θαλάμου καύσης που δημιουργήθηκε στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας σε δύο εφαρμογές, μια με μόνο το θάλαμο καύσης και μια με μοντέλο μηχανής turbojet. Πριν από την εκτέλεση των προσομοιώσεων έγιναν ορισμένες τροποποιήσεις όσον αφορά στη λειτουργικότητα της συνιστώσας. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να αλλάξει τα δεδομένα που απαιτούνται για την εκτέλεση του CEA κατευθείαν από τις επιλογές της συνιστώσας

του θαλάμου καύσης ή από τη συνιστώσα General. Και στις δύο περιπτώσεις εκτελούνται πειράματα με καύσιμο Jet-A(L). Η νέα συνιστώσα υποκαθιστά επιτυχώς την παλαιά.

Τα μεγέθη που ελέγχονται είναι η θερμοκρασία εξόδου από το θάλαμο καύσης και η ειδική κατανάλωση καυσίμου (TSFC) συναρτήσει της παροχής μάζας καυσίμου. Τα αποτελέσματα που εξάγονται είναι σύμφωνα με τη θεωρία και στην περίπτωση της πλήρους καύσης και της πλήρους διάστασης των προϊόντων της καύσης. Με άλλα λόγια το λογισμικό CEA έχει ενσωματωθεί επιτυχώς στο PROOSIS.

Οι αποκλίσεις του μοντέλου της πλήρους διάστασης της καύσης από το μοντέλο πλήρους καύσης είναι σημαντικές και γι αυτό το λόγο κρίνεται απαραίτητη η χρησιμοποίηση αυτού του μοντέλου σε επόμενες προσομοιώσεις. Επομένως ο χρήστης μπορεί να εκμεταλλευτεί τα πλεονεκτήματα του νέου μοντέλου εργαζόμενου μέσου και να εκτελέσει πείραμα με οποιοδήποτε καύσιμο της μορφής C_mH_nS_pO_qN_r σε οποιαδήποτε πίεση με απλή εισαγωγή των επιθυμητών δεδομένων στις επιλογές του θαλάμου καύσης ή στη συνιστώσα General. Πρέπει να σημειωθεί όμως ότι ο χρόνος που απαιτείται για την εκτέλεση της προσομοίωσης με τη νέα συνιστώσα είναι πολύ μεγαλύτερος από το χρόνο που απαιτείται για την προσομοίωση με χρήση του παλαιότερου μοντέλου θαλάμου καύσης. Η μείωση του χρόνου επεξεργασίας θα μπορούσε να αποτελέσει αντικείμενο περαιτέρω μελέτης σε άλλη εργασία. Αξίζει να σημειωθεί επίσης ότι αντικείμενο μελέτης μπορεί να αποτελέσει η θεώρηση πλήρους διάστασης της καύσης από ολόκληρη τη μηχανή και όχι μόνο από το θάλαμο καύσης όπως έγινε στην παρούσα διπλωματική εργασία.

Εναλλακτικά καύσιμα για αεροπορικούς κινητήρες

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια βιβλιογραφική ανασκόπηση για εναλλακτικά καύσιμα για αεροπορικούς κινητήρες, αναλύοντας τις ιδιαίτερες απαιτήσεις που έχουν αυτά, τις σύγχρονες τάσεις, και τα αποτελέσματα που προκύπτουν από πειράματα χρησιμοποίηση τους σε υφιστάμενους κινητήρες.

Η αεροπλοΐα χρησιμοποιεί καύσιμα με βάση το πετρέλαιο. Αυτή η επιλογή δεν είναι τυχαία και έχει στηριχθεί στα πλεονεκτήματα που προσφέρουν αυτά τα καύσιμα. Τα υγρά καύσιμα έχουν υψηλότερο ενεργειακό περιεχόμενο ανά μονάδα όγκου από τα αέρια και είναι ευκολότερα στην διαχείριση τους από τα στερεά. Επιπλέον ανάμεσα στα υγρά καύσιμα, οι υγροί υδρογονάνθρακες έχουν μέχρι στιγμής τον καλύτερο συνδυασμό ενεργειακού περιεχομένου, διαθεσιμότητας και τιμής.

Παρόλα αυτά, οι κυβερνήσεις και οι επιχειρήσεις έχουν κληθεί να μειώσουν τη συμβολή του ανθρώπινου παράγοντα στην κλιματική αλλαγή. Τα εναλλακτικά καύσιμα είναι ζωτικής σημασίας για την μιας καθαρότερης πηγής ενέργειας για τον παγκόσμιο στόλο αεροσκαφών και να συμβάλλει στη μείωση των αρνητικών επιπτώσεων των εναέριων μεταφορών στην ατμόσφαιρα και τον πλανήτη γενικότερα.

5.1 Η αναγκαιότητα για ανάπτυξη εναλλακτικών καυσίμων

Η τεχνολογική πρόοδος και οι προηγμένες επιχειρησιακές μέθοδοι (όπως η ρύθμιση της εναέριας κυκλοφορίας) διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο στην προσπάθεια μείωσης της κατανάλωσης καυσίμου και της σχετικής εκπομπής διοξειδίου του άνθρακα. Σημαντική πρόοδος έχει σημειωθεί στην καθιέρωση στόχων για μείωση των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου (GHG) από τα αεροσκάφη.

Η απόδοση της πτήσης αναμένεται να αυξάνεται συνεχώς με τη πάροδο του χρόνου και τη βελτίωση της τεχνολογίας, με αποτέλεσμα τη μείωση του χρησιμοποιούμενου καυσίμου για την ίδια αποστολή και συνεπώς τη μείωση των εκπεμπόμενων ρύπων. Παρόλα αυτά, ακόμα και με το πιο αισιόδοξο σενάριο τεχνολογικής προόδου, η προβλεπόμενη αύξηση σε απόδοση δεν αντισταθμίζει την αναμενόμενη αύξηση των εκπομπών καυσαερίων λόγω αύξησης της εναέριας κυκλοφορίας. Μία ελπιδοφόρα προσέγγιση για την βελτίωση αυτής της κατάστασης είναι η ανάπτυξη και η χρήση βιώσιμων εναλλακτικών καυσίμων για την αεροπλοΐα. Εξάλλου τα εναλλακτικά καύσιμα θα μπορούν να αποτελέσουν σταθεροποιητικό παράγοντα για την τιμή του πετρελαίου.

Παρά την πρόοδο προς αυτή την κατεύθυνση, η παραγωγή τέτοιων καυσίμων δεν βρίσκεται σε επίπεδα τέτοια ώστε να καλύψει τις ανάγκες της πολιτικής αεροπορίας.

Βραχυπρόθεσμα τα drop-in καύσιμα, δηλαδή τα μείγματα συμβατικών με συνθετικό καύσιμο, αποτελούν μονόδρομο για την μείωση των ρύπων. Τέτοια καύσιμα δεν απαιτούν τροποποιήσεις στους κινητήρες στα συστήματα διαχείρισης και εφοδιασμού ή στις εγκαταστάσεις αποθήκευσης.

Η αεροπορική βιομηχανία ενδιαφέρεται να αναπτύξει καύσιμα τα οποία μπορούν να παραχθούν μαζικά με χαμηλό κόστος με ελάχιστες επιπτώσεις για το περιβάλλον. Αυτά τα βιοκαύσιμα πρέπει να προέρχονται από καλλιέργειες ταχέως αναπτυσσόμενων φυτών, τα οποία όμως δεν θα καλλιεργούνται σε εδάφη εύφορα για ζωτικότερης σημασίας φυτά (δηλαδή που θα χρησιμεύσουν ως τρόφιμα), δεν απαιτούν μεγάλες ποσότητες παρασιτοκτόνων, λιπάσματος και νερού δεν απειλούν τη βιοποικιλότητα, προωθούν κοινωνικά και οικονομικά τις τοπικές κοινωνίες και εν τέλει, καιόμενα, παρουσιάζουν χαμηλότερη εκπομπή διοξειδίου του άνθρακα.

Πολλά βιοκαύσιμα πρώτης γενιάς, όπως η αιθανόλη που παράγεται από το καλαμπόκι, ανταγωνίζεται σε εύφορο έδαφος με καλλιέργειες που προορίζονται για τρόφιμα και ενδέχεται να συμβάλλουν στην αποψίλωση των καλλιεργειών και στη μείωση των αποθεμάτων νερού. Προφανώς η αεροπορική βιομηχανία δεν μπορεί να στηριχθεί σε καύσιμα που παράγονται καταυτόν τον τρόπο. Τα βιοκαύσιμα δεύτερης γενιάς αποτελούν επομένως μια πολλά υποσχόμενη λύση για την μείωση των εκπομπών διοξειδίου του άνθρακα. Θεωρητικά η ιδέα, η οποία απεικονίζεται και στο Σχήμα 5.1 έχει ως εξής: Καλλιέργειες φυτών ή άλγης απορροφούν το διοξείδιο του άνθρακα του περιβάλλοντος κατά τη φωτοσύνθεση και διασπούν τον άνθρακα από το οξυγόνο για την ανάπτυξη και τον μεταβολισμό τους. Αφού τα φυτά αυτά μετατραπούν σε καύσιμο, ο 'αποθηκευμένος' άνθρακας στο καύσιμο επιστρέφει στην ατμόσφαιρα κατά την καύση.



Σχήμα 5.1: Διάγραμμα κύκλου ζωής συμβατικών καυσίμων και βιοκαυσίμων

Έτσι το καύσιμο έχει θεωρητικά (σχεδόν) μηδενικούς ρύπους, διότι η ποσότητα του άνθρακα από την ατμόσφαιρα που απορροφάται είναι περίπου ίση με την ποσότητα του άνθρακα που εκλύεται κατά την καύση του καυσίμου. Παρόλα αυτά πρέπει να ληφθούν υπόψη και εκπομπές καυσαερίων που προέρχονται από τη λειτουργία του εξοπλισμού που απαιτείται για την καλλιέργεια των φυτών αυτών τη μεταφορά τους και την επεξεργασία του καυσίμου. Εκτιμάται ότι μετά τον συνυπολογισμό αυτών των εκπομπών οι συνολικές εκπομπές CO₂ μειώνονται έως και 80% σε όλο τον κύκλο ζωής του καυσίμου. Για παράδειγμα, από την ανάλυση καλλιεργειών από camelina για την αεροπλοΐα προκύπτει μείωση κατά 84%. Επιπλέον επιτυγχάνεται μεγαλύτερη μείωση SO₂ και αιθάλης από τη πρόοδο της παρούσας τεχνολογίας για τα συμβατικά καύσιμα.

Ωστόσο η απαιτούμενη τεχνολογία βρίσκεται ακόμη σε πρώιμο στάδιο και η τεχνογνωσία σε αυτόν τον τομέα είναι περιορισμένη. Υπάρχουν επίσης αμφιβολίες για το αν επαρκούν καλλιέργειες για την πλήρη κάλυψη των αναγκών της αεροπλοΐας. Πρέπει ακόμη να σημειωθεί και η φόβος που εκφράζεται ότι η ανάπτυξη καλλιεργειών σε αυτό το βαθμό μπορεί να επηρεάσει ακόμα και την ανθρώπινη τροφική αλυσίδα. Ακόμα και καλλιέργειες που έχουν ελάχιστη σχέση με τροφή όπως το ξύλο ή το jatropha απαιτούν γη, νερό και ανθρώπινο δυναμικό που αλλιώς θα χρησιμοποιούνταν σε καλλιέργειες προϊόντων που μπορούν να καταναλωθούν ως τροφή.

5.2 Κριτήρια καταλληλότητας καυσίμων

Η πολιτική αεροπορία είναι μια τεράστια επιχείρηση περίπου 16000 αεροσκαφών η οποία στηρίζεται προς το παρόν σε ένα και μόνο καύσιμο, το οποίο προκύπτει από ορυκτά καύσιμα και ευθύνεται για το 2-3% των ανθρωπογενών εκπομπών διοξειδίου του άνθρακα.

Αντίθετα με την χρήση εναλλακτικών καυσίμων σε άλλους τομείς, για την εφαρμογή τους στην αεροπλοΐα υπάρχουν πολλοί περισσότεροι περιορισμοί. Γενικά τα αεροπορικά καύσιμα πρέπει να πληρούν τις ακόλουθες προϋποθέσεις:

- Μείωση κινδύνων πυρκαγιάς(που σημαίνει χαμηλή πίεση ατμών, χαμηλή πτητικότητα, υψηλό σημείο ανάφλεξης και υψηλή αγωγιμότητα για να ελαχιστοποιείται η ανάπτυξη στατικού ηλεκτρισμού κατά την τροφοδοσία)
- Υψηλή θερμογόνο δύναμη, για ελαχιστοποίηση της ποσότητας που απαιτείται για συγκεκριμένη εμβέλεια.
- Χαμηλή τάση ατμών, για να ελαχιστοποιούνται οι απώλειες από ατμοποίηση σε χαμηλές πιέσεις (μεγάλα ύψη πτήσης)
- Η ευκολία διαχείρισης από το σύστημα καυσίμου, για τροφοδοσία των θαλάμων καύσης
- Χαμηλό ιξώδες, για να είναι εύκολη η άντληση και ο διασκορπισμός
- Απουσία εμφράξεων είτε από κρυστάλλους στερεοποιημένου καυσίμου σε χαμηλές θερμοκρασίες είτε από κρυστάλλους κεριού που σχηματίζεται μέσα στο καύσιμο (για αποφυγή τέτοιων προβλημάτων χρησιμοποιούνται πρόσθετα στο καύσιμο)

Υψηλή λιπαντική ικανότητα, για ελαχιστοποίηση φθορών της αντλίας καυσίμου.

Τέλος για την καλή λειτουργία του θαλάμου καύσης το καύσιμο πρέπει:

- Να έχει καλό διασκορπισμό (εδώ παίζει ρόλο κυρίως η συνεκτικότητα)
- Να μην περιέχει ουσίες που μπορεί να προκαλέσουν εμφράξεις σε σωλινίσκους ή ακροφύσια καυσίμου
- Να υφίσταται γρήγορη αεριοποίηση
- Να είναι ελαχιστοποιημένος ο σχηματισμός εξανθρακωμάτων

Διαπιστώνεται ότι μερικές από αυτές τις απαιτήσεις (όπως η γρήγορη αεριοποίηση και η χαμηλή πιθανότητα έκρηξης) είναι αντίθετες η μια από την άλλη πράγμα που φανερώνει την δυσκολία να εκπληρώνονται όλες αυτές οι απαιτήσεις ταυτόχρονα. Αφού το κεφάλαιο αυτό ασχολείται με τη χρησιμοποίηση εναλλακτικών καυσίμων, κρίνεται σκόπιμη η σύγκριση αυτών με συμβατικά καύσιμα και ο σχολιασμός των διαφορών που προκύπτουν.

Τα χαρακτηριστικά των υδρογονανθράκων είναι ευκόλως κατανοητά: οι πυκνότεροι από τα συμβατικά καύσιμα υδρογονάνθρακες τείνουν να έχουν υψηλότερο ιξώδες και περιεκτικότητα σε αρωματικούς υδρογονάνθρακες, χαμηλότερη θερμική ευστάθεια και εξατμίζονται δυσκολότερα. Περίπου το αντίθετο συμβαίνει με αραιότερους υδρογονάνθρακες. Επιπλέον, υψηλότερη περιεκτικότητα σε άνθρακα ή χαμηλότερη περιεκτικότητα σε υδρογόνο που δημιουργούν χαμηλότερη αδιαβατική θερμοκρασία καύσης προκαλούν μειωμένα NO_x.

Παρόλο που τα εναλλακτικά καύσιμα έχουν παρόμοιες συμπεριφορές με τους υδρογονάνθρακες, αυτές είναι λιγότερο κατανοητές. Όσο μεγαλύτερη η χημική δομή στο καύσιμο, αυτό τείνει να έχει χαμηλότερη περιεκτικότητα σε υδρογόνο για υδρογονάνθρακες με παραπλήσια πυκνότητα. Αυτό οδηγεί σε χαμηλότερη ενέργεια ανά μονάδα όγκου παρόλο που το ειδικό ενεργειακό περιεχόμενο αυξάνεται δραματικά με το μέγεθος του μορίου. Στην περίπτωση μεγάλων μορίων είναι αυξημένη η πιθανότητα σχηματισμού εμφράξεων σε χαμηλές θερμοκρασίες που καθιστούν τα αντίστοιχα καύσιμα μη ιδανικά για πτήση.

Για να μπορέσει ένα (εναλλακτικό) καύσιμο να αντικαταστήσει το υπάρχον πρέπει να είναι υψηλών επιδόσεων και να ανταποκρίνεται με επιτυχία σε όλο το εύρος μιας αποστολής πτήσης. Επίσης δεν πρέπει η ασφάλεια του αεροσκάφους και των επιβατών να τίθεται σε κίνδυνο λόγω του νέου καυσίμου. Το υποψήφιο εναλλακτικό καύσιμο πρέπει να πληρεί ορισμένες προϋποθέσεις για μπορέσει να είναι κατάλληλο για πτήση, οι οποίες παρατίθενται στον Πίνακας 5.1.

Σημείο ανάφλεξης	38°C ελάχιστη
Σημείο πήξης	-47°C
Κατώτερη θερμογόνος	42.8 MJ/kg ελάχιστη
δύναμη	
Ιξώδες	8000 mm ² /s μέγιστο
Περιεκτικότητα σε θείο	0.3 ppm
Πυκνότητα	$775-840 \text{ kg/m}^3$

Πίνακας 5.1: Απαιτούμενες προδιαγραφές για καύσιμα αεροπορικών κινητήρων

5.2.1 <u>Αριθμός Wobbe (Wobbe index)</u>

Ο αριθμός Wobbe προκύπτει από το πηλίκο της κατώτερης θερμογόνου δύναμης δια της ειδικής βαρύτητας ενός καυσίμου.

$$I_w = \frac{LHV}{\sqrt{SG}} \tag{5.1}$$

Το Σχήμα 5.2 δείχνει τη σχέση μεταξύ της κατώτερης θερμογόνου δύναμης και της πυκνότητας για μια σειρά από καύσιμα. Στο διάγραμμα αυτό η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή δείχνει σταθερή θερμογόνο δύναμη 42.8 MJ/kg. Αυτή η θερμογόνος δύναμη θεωρείται το κατώτερο όριο καταλληλότητας για την αεροπλοΐα. Υπάρχουν επίσης και δύο κάθετες γραμμές οι οποίες αντιπροσωπεύουν τα υπάρχοντα όρια καταλληλότητας για την πυκνότητα του καυσίμου (δηλαδή μεταξύ 775-840 kg/m³). Το διάγραμμα αυτό κατηγοριοποιεί κατά κάποιο τρόπο τις οικογένειες καυσίμων. Στους βιομηχανικούς αεριοστρόβιλους που τροφοδοτούνται από αέρια καύσιμα ο σκοπός της εισαγωγής του Wobbe Index ήταν να βρεθεί η δυνατή απόκλιση μεταξύ ενός εναλλακτικού καυσίμου και του καυσίμου που είχε αρχικά σχεδιαστεί ο αεριοστρόβιλος. Για υγρά καύσιμα αυτό δεν επαρκεί, διότι υπεισέργονται και άλλες ιδιότητες που αφορούν το καύσιμο και επηρεάζουν την καταλληλότητα του για πτήση όπως η επιφανειακή τάση και το ιξώδες. Το ιδανικό καύσιμο θα είχε ταυτόχρονα μεγάλη πυκνότητα και κατώτερη θερμογόνο δύναμη. Υπάρχουν καύσιμα με υψηλό ενεργειακό περιεχόμενο όπως το pentaborene το οποίο όμως λόγω της τοξικότητας του θεωρείται μόνο καύσιμο έκτακτης ανάγκης. Γενικότερα τα βαρύτερα καύσιμα έχουν μεγαλύτερη ενέργεια ανά μονάδα όγκου και τα ελαφρύτερα έχουν υψηλότερη ειδική ενέργεια.

Το Σχήμα 5.2 δείχνει τη σχέση μεταξύ της κατώτερης θερμογόνου δύναμης (LCV) και της πυκνότητας του καυσίμου για μια σειρά από καύσιμα. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά θερμογόνο δύναμη 42.8 MJ/kg, και οι δύο κάθετες

διακεκομμένες αναπαριστούν πυκνότητα που βρίσκεται ανάμεσα σε 775 και 840 kg/m³. Οι γραμμές αυτές αποτελούν τα όρια για καύσιμα υποψήφια για χρήση στην αεροπλοΐα.



Σχήμα 5.2: Διάγραμμα πυκνότητας κατώτερης θερμογόνο δύναμης.

5.2.2 <u>Εμβέλεια αεροσκάφους</u>

Κάθε καύσιμο επηρεάζει και την αποστολή του εκάστοτε αεροσκάφους όσον αφορά στην εμβέλεια που έχει. Στην αρχή της πτήσης [18] το αρχικό βάρος του αεροσκάφους W_0 είναι συνήθως το μέγιστο δυνατό. Το σε τί συνίσταται το βάρος αυτό εξαρτάται από το αναμενόμενο ωφέλιμο φορτίο και στο απαιτούμενο καύσιμο για την συγκεκριμένη πτήση και το βάρος του αεροσκάφους αυτού καθεαυτού συμπεριλαμβανομένου και του πληρώματος. Τα παραπάνω περιγράφονται στη σχέση

$$W_e + W_p + W_f = W_o \le W_{\max} \tag{5.2}$$

όπου:

We : Το βάρος του (άδειου, συμπεριλαμβανομένου του πληρώματος) αεροσκάφους

W_p : Το ωφέλιμο φορτίο

 W_f :Το βάρος των καυσίμων

W_{max} : Το μέγιστο βάρος

Προφανώς εάν το φορτίο είναι μεγαλύτερο από το μέγιστο δυνατό το αεροσκάφος θα έχει δυσκολία στην απογείωση και στην χειρότερη περίπτωση δεν θα είναι ασφαλής η προσγείωση του. Εάν το συνολικό φορτίο δεν είναι κοντά στο μέγιστο, η χρήση του συγκεκριμένου αεροσκάφους για την συγκεκριμένη πτήση (αν δεν δικαιολογείται από άλλα κριτήρια) κρίνεται ασύμφορη διότι το αεροσκάφος και οι κινητήρες του είναι υπερβολικοί για την πτήση, γεγονός που οδηγεί σε υψηλότερη κατανάλωση ενέργειας από την αναμενόμενη.

Υπάρχουν όμως περιορισμοί στην παραπάνω σχέση, καθώς ο όγκος που διατίθεται για το ωφέλιμο φορτίο και για το καύσιμο είναι περιορισμένος. Η παρατήρηση αυτή ενώ δεν είναι ιδιαίτερα σημαντική για το ωφέλιμο φορτίο καθώς το όριο όγκου επέρχεται αργότερα από το όριο βάρους, ο περιορισμένος όγκος καυσίμου καθίσταται σημαντικός παράγοντας για την εμβέλεια του αεροσκάφους. Για καύσιμο χαμηλής πυκνότητας και υψηλής θερμογόνου δύναμης η εμβέλεια καθορίζεται από τον όγκο των δεξαμενών καυσίμου. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω όταν το συνολικό βάρος του αεροσκάφους δεν βρίσκεται κοντά στο μέγιστο τότε η πτήση είναι ασύμφορη.

Η επιλογή βαρέως ή ελαφρού καυσίμου επηρεάζει σημαντικά και την εμβέλεια του αεροσκάφους. Στο Σχήμα 5.3 παρουσιάζεται ένα διάγραμμα εμβέλειας ωφέλιμου φορτίου για διάφορα καύσιμα σε Boeing 747-200 [18].

Όσον αφορά στους υδρογονάνθρακες, καθώς αυξάνεται η πυκνότητα τους η εμβέλεια αυξάνεται ρυθμίζοντας κατάλληλα το ωφέλιμο φορτίο και την ποσότητα του καυσίμου καυσίμων. Σε υψηλότερες πυκνότητες (μεγαλύτερες από 920 kg/m³) η πυκνότητα θεωρείται αρκετά υψηλή ώστε η εμβέλεια να μην περιορίζεται από το μέγεθος των δεξαμενών καυσίμου. Όμως καθώς η θερμογόνος δύναμη μειώνεται, μειώνεται και η εμβέλεια του αεροσκάφους.

Ορισμένοι υδρογονάνθρακες ιδιαίτερα στην περιοχή πυκνότητας από 560-775 kg/m³ προσφέρουν μεγαλύτερη εμβέλεια από το συμβατικό καύσιμο για το μέγιστο ωφέλιμο φορτίο. Παρόλα αυτά η αύξηση της εμβέλειας για μέγιστο ωφέλιμο φορτίο είναι ελάχιστη (της τάξης του 1.2%). Στην ίδια μελέτη υπάρχει και ένα διάγραμμα με τις εμβέλειες εναλλακτικών καυσίμων όπως αλκοόλες, FAMEs και SPK. Η ανάλυση αυτή όμως παρουσιάζει μίγματα 100% των εναλλακτικών καυσίμων, και ενώ κρίνονται ακατάλληλα μπορούν να αναμειχθούν σε ορισμένο ποσοστό με συμβατικούς υδρογονάνθρακες. Σε επόμενη παράγραφο θα συζητηθεί η πυκνότητα διαφόρων μιγμάτων καυσίμων.

5.3 Είδη εναλλακτικών καυσίμων

Στις επόμενες υποπαραγράφους περιγράφονται ορισμένα καύσιμα τα οποία θεωρούνται υποψήφια εναλλακτικά. Για καθένα από αυτά συζητείται κατά πόσο είναι κατάλληλο ή όχι για χρήση στην αεροπλοΐα.



Σχήμα 5.3: Διάγραμμα εμβέλειας ωφέλιμου φορτίου για διάφορα καύσιμα σε Boeing 747-200 [18].

5.3.1 <u>Biovτήζελ (Biodiesel)</u>

Το βιοντήζελ λαμβάνεται από φυτικά έλαια (Vegetable Oils) ή από λίπος ζώων μέσω μιας διαδικασίας μετεστεροποίησης (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. 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.

Πλεονεκτήματα:

Η χρήση του βιοντήζελ ως μερικού υποκατάστατου της κηροζίνης θα μπορούσε να μειώσει της εκπομπές άνθρακα. Εκτιμάται επίσης ότι θα μπορούσε να βελτιωθεί και η ποιότητα του αέρα με παρόμοιο τρόπο όπως για το βιοντήζελ στις μηχανές εσωτερικής καύσης. Τέλος το βιοντήζελ από τις περισσότερες καλλιέργειες είναι εύκολα βιοδιασπώμενο.

Μειονεκτήματα:

Το βασικότερο μειονέκτημα είναι ότι τα μείγματα βιοντήζελ με συμβατικό καύσιμο μειώνουν την δυνατότητα του τελευταίου σε πτήση σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, οι οποίες συναντώνται σε υψηλά υψόμετρα. Ακόμα και ένα μείγμα συμβατικού καυσίμου με 2% βιοντήζελ αυξάνει το σημείο πήξης πιο πάνω από τα υφιστάμενα όρια.

5.3.2 <u>Μεθανόλη</u>

Η μεθανόλη δεν είναι κατάλληλη για καύσιμο για πολλούς και διαφόρους λόγους. Η ενέργεια ανά μονάδα όγκου και ανά μονάδα μάζας (ειδική ενέργεια) είναι μικρή, το οποίο σημαίνει ότι το καύσιμο δεν επαρκεί για να χρησιμοποιηθεί στην αεροπλοΐα. Πρακτικά ένα αεροσκάφος που θα χρησιμοποιούσε ως καύσιμο τη μεθανόλη θα είχε μικρή εμβέλεια και στην περίπτωση που γινόταν επανασχεδιασμός των αεροσκαφών με μεγαλύτερες δεξαμενές καυσίμου, θα είχαν τα αεροσκάφη υπερβολικό βάρος για απογείωση. Επιπλέον η μεθανόλη είναι επικίνδυνη για την υγεία και στην επαφή της με το δέρμα και κατά την εισπνοή της. Η καύση μεθανόλης σε χαμηλή ισχύ δημιουργεί φορμαλδεΰδη (CH₂O) και προκαλεί 'τοπικά' προβλήματα υγείας γύρω από αεροδρόμια ιδιαίτερα στο προσωπικό εδάφους. Η φορμαλδεΰδη συνδέεται με αναπνευστικά προβλήματα, ερεθισμούς στα μάτια, τη μύτη και το λαιμό και είναι καρκινογόνος. Τέλος, το σημείο ανάφλεξης της είναι 18°C είναι πολύ χαμηλότερη από την ελάχιστη απαίτηση των 38° C.

5.3.3 <u>Αιθανόλη</u>

Ως αλκοόλη η αιθανόλη έχει παρόμοιες ιδιότητες με τη μεθανόλη οπότε και αυτή είναι ακατάλληλη για καύσιμο για την αεροπλοΐα. Η ειδική ενέργεια και ενέργεια ανά μονάδα όγκου της αιθανόλης. Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω το γεγονός αυτό περιορίζει την εμβέλεια και το ωφέλιμο φορτίο του αεροσκάφους. Σε χαμηλή ισχύ κινητήρες που τροφοδοτούνται με αιθανόλη εκπέμπουν ακεταλδεϋδη (C₂H₄O) επιφέροντας τα ίδια προβλήματα υγείας γύρω από τα αεροδρόμια και στο προσωπικό εδάφους. Το σημείο ανάφλεξης της αιθανόλης είναι ακατάλληλη για αεροπορικούς κινητήρες.

5.3.4 <u>Υδρογόνο</u>

Η χρήση υγρού υδρογόνου (LH₂) έχει περιβαλλοντικά οφέλη αν το υδρογόνο προέρχεται από αεριοποίηση (gasification) βιομάζας ή από την ηλεκτρόλυση νερού χρησιμοποιώντας ηλεκτρική ενέργεια από ανανεώσιμες πηγές. Η χρήση του υγρού υδρογόνο ως καυσίμου αεροσκαφών προϋποθέτει την τροποποίηση ή και αλλαγή των υφιστάμενων κινητήρων και ατράκτων. Το κυρίως προϊόν της καύσης του υδρογόνου είναι νερό και τα μοναδικά υποπροϊόντα αξιομινημόνευτης συγκέντρωσης είναι τα οξείδια του αζώτου (NO_x). Η καύση υδρογόνου δεν παράγει CO₂, CO, άκαυστους υδρογονάνθρακες, οξείδια του θείου (SO_x) ή τέφρα, τα οποία ως γνωστόν παράγονται από τα συμβατικά καύσιμα.

Η καύση υδρογόνο παράγει 2,6 φορές περισσότερο νερό από μια ποσότητα συμβατικού καυσίμου με το ίδιο ενεργειακό περιεχόμενο. Το γεγονός αυτό είναι πολύ σημαντικό καθώς σε μεγάλα υψόμετρα το νερό συμπεριφέρεται ως αέριο του θερμοκηπίου. Πάνω από τα 6000m όπου το νερό συμπυκνώνεται και σχηματίζει λεπτά νέφη πάγου η συνεισφορά στο φαινόμενο του θερμοκηπίου είναι μεγαλύτερη για το νερό απ' ότι για το CO₂. Παρόλα αυτά το διοξείδιο του άνθρακα έχει μεγαλύτερο χρόνο

παραμονής, περίπου 100 χρόνια, ανεξαρτήτως υψομέτρου σε αντιδιαστολή με τις 3-4 μέρες σε μηδενικό υψόμετρο και 0,5-1 χρόνο στη στρατόσφαιρα για το νερό.

Τα οξείδια του αζώτου παράγονται σε ευθεία αναλογία με την θερμοκρασία φλόγας και το χρόνο παραμονής στο θάλαμο καύσης. Για τη μείωση των εκπομπών NO_x χρειάζεται βελτίωση των υφιστάμενων θαλάμων καύσης ώστε να ανταποκρίνονται στις ιδιαίτερες απαιτήσεις του υδρογόνου. Μερικές από τις τροποποιήσεις είναι η καύση σε χαμηλή θερμοκρασία, μικρός χρόνος παραμονής στο θάλαμο καύσης και η διαμόρφωση ομογενούς μείγματος καυσίμου αέρα. Τη δεκαετία του '90 το Ευρωπαϊκο-Καναδικό "Euro-Quebec Hydro-Hydrogen Pilot Project" απέδειξε ότι στροβιλοαντιδραστήρες τροφοδοτούμενοι με υγρό υδρογόνο είναι δυνατόν να έχουν χαμηλές εκπομπές διοξειδίου του αζώτου.

Για δεδομένο ενεργειακό περιεχόμενο καταλαμβάνει 4 φορές περισσότερο όγκο από το συμβατικό καύσιμο αλλά ζυγίζει περίπου 2.6 φορές λιγότερο. Το χαμηλότερο ενεργειακό περιεχόμενο ανά μονάδα όγκου προφανώς σημαίνει ότι ένα αεροσκάφος θα πρέπει να έχει μεγαλύτερη δεξαμενή καυσίμων. Επιπλέον οι δεξαμενές αυτές θα πρέπει να μονώνουν κατάλληλα το υγρό υδρογόνο. Για μεγάλα πολιτικά αεροσκάφη η τοποθέτηση των δεξαμενών πάνω από την άτρακτο φαίνεται μια πρακτική λύση ενώ για μικρότερα η τοποθέτηση των δεξαμενών κάτω από τις πτέρυγες είναι μια δυνατή λύση. Μελλοντικά πτέρυγες όπως η 'blended wing body' θα αποτελέσουν πιθανώς την προτιμητέα λύση για την αποθήκευση του υγρού υδρογόνου.

Η μεγαλύτερη ειδική ενέργεια του υδρογόνου καθιστά το υδρογόνο ελαφρύτερο από το συμβατικό καύσιμο. Αυτό το πλεονέκτημα αντισταθμίζεται εν μέρει από τις μεγαλύτερες δεξαμενές καυσίμου όπως αναφέρθηκε παραπάνω και από το βάρος των επιπλέον εξαρτημάτων που απαιτούνται όπως εναλλάκτες θερμότητας και βαλβίδες ανακουφίσεως όμως εκτιμάται ότι τα αεροσκάφη υγρού υδρογόνου θα έχουν μεγαλύτερο ωφέλιμο φορτίο.

Υπάρχουν ανησυχίες σχετικά με την ασφάλεια του υγρού υδρογόνου είτε αφορά την εφαρμογή του σε χερσαίες μεταφορές, στατικές εφαρμογές είτε αεροσκάφη. Τα μείγματα υδρογόνου αέρα εκρήγνυνται όπως τα χαμηλότερα αλκάνια και αλκένια. Όμως η φλόγα που προκύπτει από το υδρογόνο σβήνεται πιο εύκολα.

Όπως φαίνεται παραπάνω η επιτυχής εφαρμογή του υγρού υδρογόνου στα αεροσκάφη προϋποθέτει μια σειρά από βελτιώσεις και αυτό το καθιστά ως ένα πολλά υποσχόμενο μακροπρόθεσμα εναλλακτικό καύσιμο.

5.3.5 <u>Πυρηνική ενέργεια</u>

Για λόγους πληρότητας θα αναφερθεί και η δυνατότητα για πυρηνοκίνητα αεροσκάφη. Η δημιουργία ενός αεροσκάφους που θα κινείτο με πυρηνική ενέργεια ήταν πρόταση του Enrico Fermi και των συνεργατών του στο πρόγραμμα Manhattan. Υπήρχε η πεποίθηση ότι ένα τέτοιο αεροσκάφος θα είχε σχεδόν απεριόριστη εμβέλεια και θα ήταν δυνατόν να αναπτύξουν πολύ μεγαλύτερες ταχύτητες από άλλα αεροσκάφη εκείνης της εποχής. Για αυτό το σκοπό η πολεμική αεροπορία των ΗΠΑ εισήγαγε το 1946 το Nuclear Energy for the Propulsion of Aircraft project το οποίο το 1951 μετονομάσθηκε σε Aircraft Nuclear Propulsion (ANP) Program. Τα δυο κύρια προβλήματα αεροσκαφών που τροφοδοτούνται με πυρηνική ενέργεια ήταν ανέκαθεν το αυξημένο βάρος και η ασφάλεια. Για παράδειγμα σε ένα από τα πρώτα σχέδια το προωστικό σύστημα ζύγιζε 80 τόνους, από τα οποία ο αντιδραστήρας 5 τόνους και περίπου 50 τόνους η θωράκιση του. Όσον αφορά στην ασφάλεια τέτοιων αεροσκαφών υπάρχουν πολλά ζητήματα με τις εκπομπές ραδιενέργειας κατά την πτήση όπως και το ενδεχόμενο έκρηξης ή ατυχήματος.

Το πρόγραμμα ANP έληξε το 1961 καθώς δεν είχε κάποιο αξιόλογο αποτέλεσμα. Σήμερα η αρνητική διεθνής κοινή γνώμη απέναντι στην πυρηνική ενέργεια μειώνει πολύ τις πιθανότητες ανάπτυξης ενός τέτοιου αεροσκάφους στο εγγύς μέλλον.

5.4 Μέθοδοι FT(Fischer-Tropsch) και HRJ (Hydroprocessed Renewable Jet)

Είναι οι δύο κυρίαρχες μέθοδοι παραγωγής εναλλακτικών καυσίμων. Η ASTM (American Society for Testing and Materials) έχει δημιουργήσει προδιαγραφές για εναλλακτικά καύσιμα, το ASTMD 7566 το οποίο είναι εγκεκριμένο από τις υπηρεσίες πολιτικής αεροπορίας .Τα καύσιμα με FT είναι εγκεκριμένα κατά ASTMD 7566 για χρησιμοποίηση τους μέχρι μείγμα 50% με συμβατικό καύσιμο, ενώ αναμένεται ακόμα η έγκριση του HRJ.

Η αντίδραση (ή σύνθεση) Fischer-Tropsch [23] είναι μια χημική διαδικασία κατά την οποία ένα μείγμα μονοξειδίου του άνθρακα και υδρογόνου παράγουν παρουσία καταλύτη υγρούς υδρογονάνθρακες πολλών ειδών. Οι πιο κοινοί καταλύτες έχουν βάση το σίδηρο και το κοβάλτιο, αν και έχουν χρησιμοποιηθεί και καταλύτες νικελίου και ρουθηνίου. Ο κύριος σκοπός αυτής της χημικής αντίδρασης είναι η παραγωγή συνθετικού υποκατάστατου του πετρελαίου, συνήθως από άνθρακα (CtL, Coal to Liquid) φυσικό αέριο (GtL, Gas to liquid) ή βιομάζα (BtL, Biomass to liquid) σαν συνθετικό λιπαντικό ή σαν συνθετικό καύσιμο.

5.4.1 <u>Χημική διαδικασία</u>

Η μέθοδος Fischer-Tropsch αποτελείται από χημικές αντιδράσεις οι οποίες καταλήγουν σε μια σειρά από επιθυμητά προϊόντα και ανεπιθύμητα παραπροϊόντα. Οι πιο σημαντικές αντιδράσεις είναι αυτές που καταλήγουν στο σχηματισμό αλκανίων. Αυτές οι αντιδράσεις έχουν τον γενικό χημικό τύπο:

$$(2n+1)H_2 + nCO \rightarrow C_n H_{2n+2} + nH_2O$$
 (5.3)

Η απλούστερη από αυτές τις αντιδράσεις (όπου δηλαδή n=1) παράγει το μεθάνιο (CH₄) το οποίο είναι γενικά ανεπιθύμητο παραπροϊόν. Οι συνθήκες των αντιδράσεων και οι καταλύτες επιλέγονται κατάλληλα ώστε να ελαχιστοποιείται η παραγωγή μεθανίου, δηλαδή να ευνοούνται οι αντιδράσεις με n>1. Τα περισσότερα αλκάνια είναι ευθείας αλυσίδας αλλά παράγονται και αλκάνια με διακλαδώσεις. Επιπλέον ανταγωνιστικές αντιδράσεις με αυτές που οδηγούν στην παραγωγή αλκανίων, παράγουν

αλκένια, αλκοόλες και υδρογονάνθρακες που περιέχουν οξυγόνο. Συνήθως παράγονται σχετικά μικρές ποσότητες μη αλκανίων όμως υπάρχουν καταλύτες που ευνοούν την δημιουργία κάποιων από αυτές τις ενώσεις.

Πολύ σημαντική αντίδραση για την ρύθμιση του λόγου H_2/CO η οποία καθορίζει και τα προϊόντα των αντιδράσεων Fischer-Tropsch είναι η εξής:

$$H_2O + CO \to H_2 + CO_2 \tag{5.4}$$

Ενώ αυτή η αντίδραση οδηγεί στην παραγωγή CO₂ είναι πολύ σημαντική για τη διαδικασία αυτή. Για παράδειγμα ο λόγος H₂/CO αερίου που προέρχεται από άνθρακα είναι περίπου 0.7 ενώ ο ιδανικός είναι 2. Σύμφωνα με στοιχεία για κάθε έναν τόνο παραγόμενων υγρών υδρογονανθράκων εκλύονται 7 τόνοι διοξειδίου του άνθρακα.

5.4.2 Συνθήκες

Συνήθως οι αντιδράσεις Fischer-Tropsch διεξάγονται σε θερμοκρασίες 150-300C. Υψηλότερες θερμοκρασίες οδηγούν σε ταχύτερες αντιδράσεις και υψηλότερη απόδοση αλλά ευνοεί όμως την παραγωγή μεθανίου. Γι' αυτό το λόγο οι θερμοκρασίες παραμένουν χαμηλές με μέσες στην παραπάνω κλίμακα. Η αύξηση της πίεσης σε υψηλότερη απόδοση ευνοεί και τον σχηματισμό μεγαλύτερων αλυσίδων αλκανίων.

5.4.3 Κατανομή προϊόντων

Τα προϊόντα των αντιδράσεων Fischer-Tropsch ακολουθούν την κατανομή Anderson-Schulz-Flory

$$W_n / n = (1 - a)^2 a^{n-1}$$
(5.5)

Όπου Wn είναι το ποσοστό των προϊόντων που τα μόρια τους αποτελούνται από n άτομα άνθρακα και α είναι η πιθανότητα που έχει το μόριο να συνεχίσει να αντιδρά και να δημιουργηθεί μια μεγαλύτερη αλυσίδα και εξαρτάται από τους καταλύτες και από τις συνθήκες στις οποίες λαμβάνει χώρα η αντίδραση. Εξετάζοντας την παραπάνω σχέση γίνεται σαφές ότι η αντίδραση Fischer-Tropsch θα παράγει κατά κύριο λόγο μεθάνιο. Ο σχηματισμός μεθανίου περιορίζεται με αύξηση του α. Πολύ μεγάλες αλυσίδες ατόμων άνθρακα δεν είναι επιθυμητές καθώς θα χρειαστεί περαιτέρω επεξεργασία για την εκμετάλλευση τους ως καύσιμα. Επομένως θεωρείται ότι υδρογονάνθρακες που μπορούν να αξιοποιηθούν ως καύσιμα για τα διάφορα μεταφορικά μέσα έχουν συνήθως (n<10). Η ταυτόχρονη ικανοποίηση και των δύο παραπάνω περιορισμών είναι ακόμη δύσκολη.

5.4.4 Σύγκριση συνθετικού και συμβατικού καυσίμου

Σε σύγκριση με το συμβατικό καύσιμο, το συνθετικό καύσιμο [24],[25],[26] έχει υψηλότερο λόγο υδρογόνου προς άνθρακα και αυτό οδηγεί σε χαμηλότερες εκπομπές σωματιδίων. Επίσης τα συνθετικά καύσιμα δεν περιέχουν θείο οπότε τα καυσαέρια δεν περιέχουν καθόλου οξείδια του θείου. Το συνθετικό καύσιμο έχει επίσης καλύτερη θερμική ευστάθεια και έχει καλύτερη συμπεριφορά σε χαμηλές θερμοκρασίες, διατηρώντας σε αυτές χαμηλό ιξώδες γεγονός που μπορεί να βελτιώσει τη συμπεριφορά του αεροσκάφους σε μεγάλα υψόμετρα και κατά την εκκίνηση του κινητήρα σε συνθήκες με χαμηλή θερμοκρασία περιβάλλοντος. Στα μειονεκτήματα των συνθετικών καυσίμων συγκαταλέγονται: 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. Μελέτες έχουν δείξει ότι συνθετικό και συμβατικό καύσιμο παρουσιάζουν παρεμφερή συμπεριφορά σε διάφορες συνθήκες.

5.4.5 Hydrotreated Renewable Jet (HRJ)

Είναι μια τεχνολογία που ακόμα δεν θεωρείται ώριμη και έχει χρησιμοποιηθεί σε δοκιμαστικές πτήσεις, και βασίζεται στην υδρογονοεπεξεργασία ορισμένες (Hydroprocessing) ελαίων τα οποία είναι κυρίως μείγμα τριγλυκεριδίων και λιπαρών οξέων. Αρχικά απομακρύνονται οι διάφορες ακαθαρσίες. Στη συνέχεια, τα έλαια μετατρέπονται σε αλκάνια στο μέγεθος αλυσίδας περίπου για το diesel, αφαιρώντας τα μόρια οξυγόνου και ύστερα άλλων στοιχείων όπως άζωτο, θείο ή μετάλλων και μετατρέποντας τα αλκένια σε αλκάνια μέσω αντίδρασης με υδρογόνο (Υδρογονοεπεξεργασία- Hydrotreatment). Η αφαίρεση του οξυγόνου αυξάνει τη θερμότητα καύσης ενός καυσίμου και η μετατροπή των αλκενίων σε αλκάνια αυξάνει την θερμική ευστάθεια του καυσίμου. Έπειτα μια δεύτερη αντίδραση ισομερίζει και διασπά τα αλκένια σε αλκάνια με αριθμό ατόμων άνθρακα μέσα στο κατάλληλο εύρος των Jet καυσίμων (Υδρογονική Πυρόλυση-Hydrocracking). Επομένως το τελικό προϊόν περιέχει τον ίδιο τύπο μορίων που περιέχονται και στο συμβατικό καύσιμο που προέργεται από το πετρέλαιο, ανεξάρτητα από το αρχικό προϊόν. Ένα (εναλλακτικό) καύσιμο που έχει παραχθεί με αυτή τη διαδικασία ονομάζεται 'HRJ' ή 'Hydrotreated Renewable Jet' το οποίο έχει παρόμοιες ιδιότητες με το συμβατικό καύσιμο. Η παραπάνω διαδικασία παραγωγής καυσίμου HRJ απεικονίζεται και στο Σχήμα 5.4. Το HRJ καύσιμο Περιέχει μηδαμινές ακαθαρσίες και πρακτικά δεν περιέχει καθόλου θείο. Όσον αφορά στις επιδόσεις και στις εκπομπές καυσαερίων σε δοκιμαστικές πτήσεις [28] με μείγμα 25 και 50% με συμβατικό καύσιμο ήταν εντός των προδιαγραφών για το συμβατικό καύσιμο. Με αυτά τα ενθαρρυντικά στοιχεία η έγκριση χρήσης τέτοιων καυσίμων μέχρι ποσοστού 50% αναμένεται να γίνει στο εγγύς μέλλον.



Σχήμα 5.4: Διαδικασία παραγωγής καυσίμου HRJ [28]

5.5 Πυκνότητα

Η πυκνότητα είναι από τις σημαντικότερες ιδιότητες του καυσίμου αεροπορικών κινητήρων. Ενώ δεν έχει ουσιαστική επίδραση στις επιδόσεις των κινητήρων, από την πυκνότητα του καυσίμου εξαρτάται η εμβέλεια του αεροσκάφους και το ωφέλιμο φορτίο του. Η εκτίμηση της πυκνότητας του καυσίμου που προκύπτει από ένα μείγμα άλλων καυσίμων είναι ένα ερώτημα που προέκυψε κατά την παρούσα βιβλιογραφική ανασκόπηση, καθώς μεγάλος αριθμός από τα εναλλακτικά καύσιμα προορίζονται για drop-in καύσιμα.

Μια απλή υπόθεση που μπορεί να γίνει για το μείγμα καυσίμου είναι ιδανικό διάλυμα, δηλαδή ότι ο όγκος του μείγματος ισούται με το άθροισμα των όγκων των επιμέρους καυσίμων και ότι τα καύσιμα δεν αντιδρούν μεταξύ τους. Ισχύει δηλαδή η εξής σχέση:

$$m = m_1 + m_2 = \rho_1 V_1 + \rho_2 V_2 \tag{5.6}$$

Επομένως η συνολική πυκνότητα ρ είναι:

$$\rho = \frac{m}{V} = \rho_1 \frac{V_1}{V} + \rho_2 \frac{V_2}{V}$$
(5.7)

Η παραπάνω σχέση είναι από τις ελάχιστες που μπορούν να εφαρμοστούν για να εκτιμηθεί a priori η πυκνότητα του μείγματος. Συνήθως τα μοντέλα που προβλέπουν την

απόκλιση από την ιδανική συμπεριφορά ενός μείγματος απαιτούν πολύπλοκες παραμέτρους. Ορισμένα ζητήματα που ενέχουν τέτοιου είδους μοντέλα και παράμετροι περιέχονται στο Κεφάλαιο 5, τμήμα 5-7 στο [29]. Ένα τέτοιο παράδειγμα βρίσκεται στο [30]

Στη βιβλιογραφία συνήθως δεν χρησιμοποιούνται τέτοιες πολύπλοκες μέθοδοι, και η πυκνότητα του μείγματος υπολογίζεται είτε μέσω πειραμάτων είτε μέσω της σχέσης (5.7 . Σε ορισμένες μελέτες, η σχέση αυτή αναφέρεται και χρησιμοποιείται στις περισσότερες περιπτώσεις και υπολογίζεται η απόκλιση της από πειραματικά αποτελέσματα για την πυκνότητα. Σχετικά με την απλότητα της η σχέση αυτή δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα ειδικά για diesel και μείγματα biodiesel/diesel.O Clemens [31] αναφέρει ότι η ακρίβεια της πυκνότητας μειγμάτων βιοντήζελ/ντήζελ είναι αρκετά καλή και ότι η μέγιστη απόκλιση της μετρούμενης πυκνότητας από την υπολογισθείσα είναι 0.7%. Οι Canacki και Alptekin [32] υπολογίζουν την πυκνότητα για μείγματα βιοντήζελ/ντήζελ με την ανωτέρω σχέση και τη συγκρίνουν με πειραματικές τιμές. Από τα πειραματικά στοιχεία δημιουργήθηκε μια εμπειρική γραμμική συνάρτηση συναρτήσει της περιεκτικότητας βιοντήζελ. Αναφέρεται ότι οι συναρτήσεις αυτές έχουν πολύ καλή ακρίβεια.

Οι Yang et all. [33] υποθέτουν ότι το ντήζελ, ένα μείγμα μεγάλου αριθμού υδρογονανθράκων, είναι ένα ιδανικό μείγμα και δείχνουν ότι η σχέση του ιδανικού μείγματος έχει παρόμοια αποτελέσματα με αυτά που προκύπτουν με τη μέθοδο νευρωνικών δικτύων.

Από την άλλη πλευρά οι De Menezes et all. [34] αναφέρουν ότι οι πυκνότητες του μείγματος ΕΤΒΕ (αιθηλ τερ-βούτηλαιθέρα)/ντήζελ είναι υψηλότερες από την ιδανική λόγω της αύξησης των δεσμών υδρογόνου και μείωσης του όγκου, αυξάνοντας την πυκνότητα. Παρόλα αυτά η προσθήκη αιθανόλης μειώνει τα φαινόμενα έλξης μεταξύ των υδρογονανθράκων και του ΕΤΒΕ και έτσι καθιστώντας την συμπεριφορά της πυκνότητας πιο κοντά στην ιδανική. Εκτός αυτού, η συμπεριφορά της πυκνότητας του μείγματος ΤΑΕΕ (τερ-αμυλεθυλαιθέρας)/ντήζελ είναι παρόμοια με την ιδανική. Παρόλα αυτά στο μείγμα 2 (ΜΙΧ 2) (50% κατ'όγκον ΤΑΕΕ και 50% αιθανόλη) παρατηρήθηκε μια μείωση όσον αφορά στην πυκνότητα. Επειδή το ντήζελ αποτελείται κυρίως από υδρογονάνθρακες ευθείας αλυσίδας. Αναφέρεται οτι τα μείγματα ΤΑΕΕ/ντήζελ και ΕΤΒΕ/ντήζελ τα συστατικά τους αντιδρούν μεταξύ τους οπότε δεν μπορεί να εφαρμοστεί η σχέση της ιδανικής πυκνότητας.

5.6 Σύνοψη-Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάστηκε μια βιβλιογραφική ανασκόπηση για εναλλακτικά καύσιμα για την αεροπλοΐα. Καθώς η κίνηση των αεροσκαφών αυξάνεται σε ετήσια βάση η επίτευξη των στόχων για μείωση των εκπομπών καυσαερίων από την αεροπλοΐα, χρειάζεται ταυτόχρονη αύξηση της απόδοσης των κινητήρων βελτίωση και ανάπτυξη βιώσιμων εναλλακτικών καυσίμων.

Στη συνέχεια δίνονται ορισμένες προδιαγραφές που θα πρέπει να πληρούν τα υποψήφια καύσιμα για αεροπορικούς κινητήρες. Παρουσιάζονται επίσης δύο κριτήρια τα οποία χρησιμοποιούνται για την επιλογή κατάλληλων καυσίμων, τα οποία είναι ο αριθμός Wobbe και το κριτήριο της εμβέλειας.

Ορισμένα είδη καυσίμων αναφέρονται στη συνέχεια και σχολιάζεται αν είναι κατάλληλα ή όχι για την αεροπλοΐα, όπως το βιοντήζελ, η αιθανόλη, η μεθανόλη, το υδρογόνο, τα συνθετικά καύσιμα FT (Fischer-Tropsch) και τα HRJ(Hydrotreated Renewable Jet) ή Bio-SPK (Synthetic Parafinic Kerosene).

Τέλος συζητείται το θέμα της πυκνότητας μείγματος και κατά πόσο η απλή εξίσωση (5.7) μπορεί να χρησιμοποιηθεί με ακρίβεια. Από τη βιβλιογραφία προκύπτει ότι για έναν μεγάλο αριθμό μειγμάτων η προαναφερθείσα εξίσωση είναι αρκετά ακριβής. Οι περιπτώσεις στις οποίες η σχέση αυτή έχει μεγάλη απόκλιση από την πραγματική τιμή είναι όταν το μείγμα περιέχει ενώσεις που αντιδρούν μεταξύ τους.

Ανακεφαλαίωση-Συμπεράσματα-Προτάσεις

6

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκε ένας τρόπος βελτίωσης του υπάρχοντος μοντέλου εργαζόμενου μέσου που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα μοντελοποίησης λειτουργίας αεριοστροβίλων PROOSIS, τροποποιώντας κατάλληλα τον κώδικα του λογισμικού χημικής ισορροπίας CEA (Chemical Equilibrium with Applications) της NASA.

Αρχικά περιγράφηκε εκτενώς το λογισμικό NASA CEA όσον αφορά στα χαρακτηριστικά του και στα δομικά του στοιχεία, τα οποία είναι οι βιβλιοθήκες thermo.lib και trans.lib, ο κώδικας cea2.for, και το γραφικό περιβάλλον GUI που το συνοδεύει. Στη συνέχεια αναπτύχθηκε κώδικας με βάση το CEA ο οποίος να μην απαιτεί αρχείο εισόδου μέσω του γραφικού περιβάλλοντος ή μέσω επεξεργαστή κειμένου για την εκτέλεση του αλλά να εκτελείται απευθείας από την κονσόλα, διατηρώντας ταυτόχρονα τις δυνατότητές του, για όλες τις περιπτώσεις προβλημάτων καύσης σε αεριοστροβίλους. Έτσι μπορεί να εισαχθεί σε πρόγραμμα προσομοίωσης λειτουργίας αεριοστροβίλων. Τα δεδομένα εισόδου του κώδικα περιγράφονται εκτενώς. Ο κώδικας αυτός στη συνέχεια, επιβεβαιώθηκε και διαπιστώθηκε ότι είναι απόλυτα ακριβής.

Το επόμενο στάδιο αφορούσε την ενσωμάτωση του νέου κώδικα στο λογισμικό PROOSIS. Έτσι, αναφέρεται ο υπάρχων τρόπος δημιουργίας του μοντέλου εργαζόμενου μέσου και τα εγγενή μειονεκτήματα που αυτός έχει, τα οποία είναι η ανάγκη δημιουργίας νέων πινάκων σε περίπτωση νέας τιμής της πίεσης και νέου τύπου καυσίμου. Αυτό σημαίνει ότι το μοντέλο αυτό είναι ακριβές μόνο σε περίπτωση μοντελοποίησης της καύσης για σταθερή σύσταση των προϊόντων της (no dissociation model), καθώς στην περίπτωση μοντέλου πλήρους διάστασης των προϊόντων, αλλαγή της πίεσης επιφέρει και αλλαγή στη σύσταση των καυσαερίων, όπως προβλέπει η αρχή Le Chatelier.

Ιδιαίτερη αναφορά γίνεται για τη συνιστώσα του θαλάμου καύσης στο PROOSIS, καθώς αποτελεί την σημαντικότερη συνιστώσα για την καύση. Σε άλλα λογισμικά όπως στο GasTurb μόνο στο θάλαμο καύσης υπάρχει πλήρης διάσταση των προϊόντων της καύσης ενώ στα υπόλοιπα μέρη του κινητήρα το εργαζόμενο μέσο μοντελοποιείται σύμφωνα με το μοντέλο σταθερής σύστασης των προϊόντων της καύσης.

Για την αντικατάσταση του εργαζόμενου μέσου τροποποιείται περαιτέρω ο κώδικας που αναπτύχθηκε, ώστε να είναι συμβατός με το περιβάλλον PROOSIS. Μετά την τροποποίηση συγκρίνονται τα αποτελέσματα του νέου κώδικα με τον προηγούμενο και διαπιστώνεται ότι είναι ακριβής.

Αφού ενσωματώθηκε ο κώδικας στο PROOSIS έγινε αντικατάσταση του υπάρχοντος μοντέλου εργαζόμενου μέσου. Με βάση το νέο μοντέλο εργαζόμενου μέσου και τις απαραίτητες τροποποιήσεις στον κώδικα του υπάρχοντος μοντέλου θαλάμου καύσης δημιουργήθηκε μια νέα συνιστώσα θαλάμου καύσης. Αυτή χρησιμοποιήθηκε σε δύο προσομοιώσεις, μια σε μεμονωμένο θάλαμο καύσης και μία σε μηχανή Turbojet. Συγκρίθηκαν τα μεγέθη της θερμοκρασίας εξόδου από το θάλαμο καύσης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για το αρχικό μοντέλο θαλάμου καύσης και για το νέο μοντέλο τόσο για πλήρη καύση όσο και για πλήρη διάσταση προϊόντων της καύσης. Τα αποτελέσματα κατέδειξαν πλήρη ταύτιση για το αρχικό μοντέλου και νέου μοντέλο για πλήρη διάσταση οι οποίες κρίνονται λογικές με βάση τη θεωρία.

Το τελευταίο κεφάλαιο πραγματοποιήθηκε μια βιβλιογραφική ανασκόπηση των εναλλακτικών καυσίμων σε αεροπορικούς κινητήρες. Στη συνέχεια δόθηκαν ορισμένες προδιαγραφές που θα πρέπει να πληρούν τα υποψήφια καύσιμα για αεροπορικούς κινητήρες. Παρουσιάστηκαν επίσης δύο κριτήρια τα οποία χρησιμοποιούνται για την επιλογή κατάλληλων καυσίμων. Τέλος σχολιάζεται η καταλληλότητα ορισμένων τυπικών εναλλακτικών καυσίμων για την αεροπλοΐα και γίνεται αναφορά στην πυκνότητα και τη θερμογόνο δύναμή τους που αποτελούν βασικές παραμέτρους επιλογής.

6.1 Συμπεράσματα

- Κρίνεται απαραίτητη η θεώρηση πλήρους διάστασης των προϊόντων της καύσης καθώς παρατηρούνται σημαντικές αποκλίσεις από το μοντέλο της πλήρους καύσης.
- Οι δυνατότητες του προγράμματος PROOSIS αυξήθηκαν σημαντικά με την εισαγωγή του CEA, δεδομένου ότι ο χρήστης μπορεί να εκτελέσει προσομοίωση για οποιοδήποτε καύσιμο της μορφής CHSON σε οποιαδήποτε πίεση τόσο για πλήρη καύση όσο και για πλήρη διάσταση των προϊόντων της καύσης.
- Εφόσον όλες οι συνιστώσες ενός μοντέλου αεριοστροβίλου τροποποιηθούν κατάλληλα ώστε να χρησιμοποιούν το νέο μοντέλο εργαζόμενου μέσου για τον προσδιορισμό των θερμοδυναμικών μεγεθών, θα βελτιωθεί σημαντικά η ακρίβεια των διαφόρων υπολογιζόμενων μεγεθών του μοντέλου. Με αυτό τον τρόπο το μοντέλο γίνεται πιο ρεαλιστικό και πιο κοντά στην πραγματικότητα.

6.2 Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη

- Επέκταση του νέου μοντέλου εργαζόμενου μέσου και σε συνιστώσες της βιβλιοθήκης Turbo πέρα από το θάλαμο καύσης.
- Τρόποι μείωσης χρόνου επεξεργασίας κατά την εκτέλεση προσομοιώσεων όταν χρησιμοποιείται το νέο μοντέλο.

Βιβλιογραφία

- [1] Transport, Energy and CO₂ 2009 International Energy Agency (IEA)
- [2] Μαθιουδάκης ' Λειτουργία Αεροπορικών Κινητήρων'
- [3] Καποδίστριας 'Προηγμένες Τεχνικές Μοντελοποίησης της καύσης', Διπλωματική Εργασία,2010
- [4] Τσαλαβούτας ΄ Ανάπτυξη Συστημάτων Παρακολούθησης Λειτουργίας Βιομηχανικών Αεριοστροβίλων' Διδακτορική Διατριβή Αθήνα 2004
- [5] Stephen R. Turns, 'An Introduction to Combustion: Concepts and Applications', McGraw-Hill International Editions, Mechanical Engineering Series.
- [6] Ρακόπουλος Κ., Χουντάλας Δ., 1998, 'Καύση Ρύπανση Εμβολοφόρων Μ.Ε.Κ.', Φούντας, Αθήνα 1998.
- [7] 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.
- [8] 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 Perfomance 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.
- [9] 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.
- [10] Reaction Design, 'CHEMKIN 4.1 vs Chemkin II'.
- [11] Reaction Design, 'CHEMKIN-CFD QA'.
- [12] http://www.reactiondesign.com/company/open_archive/news_20050218. htm.
- [13] Deep Gupta, 'Comparison of Combustion Calculations Using Cantera and Chemkin', BTP Stage-I.
- [14] 'Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applicatios. I-Analysis' 1994
- [15] McBride, Gordon 'Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applicatios. II-User Manual and Program Description'

- [16] A. Alexiou, A. Tsalavoutas 'Introduction to Gas Turbine Modelling with Proosis' Laboratory of Thermal Turbomachines, National Technical University of Athens
- [17] Walsh, Fletcher 'Gas Turbine Performance'
- [18] C. Wilson, S. Blakey, L. Rye 'Aviation gas Turbine alternative Fuels' Department of Mechanical Engineering, University of Sheffield, UK, 2010 Elsevier
- [19] Μαθιουδάκης 'Αρχές Αεροπορικών Κινητήρων'
- [20] 'Aviation fuels Technical Review' Chevron
- [21] A.T.A.G, Enviroaero 'Beginner's guide to Aviation Biofuels'
- [22] 'The Potential of Renewable Energy Sources in Aviation' Imperial College

[23] www.wikipedia.org/Fischer-Tropsch_process

- [24] D.Daggett and O.Hadaller, R.Hendricks, R. Walther 'Alternative Fuels and Their Potential Impact on Aviation' 25th international Congress of the Aeronautical Sciences
- [25] Fredrik Hermann, Jens Klingmann, Rolf Gabrielsson 'Chemical Analysis of Combustion Products From a high-Pressure Gas turbine Combustor Rig Fueled by JetA1 Fuel and a Fischer-Tropsch-Based Fuel',GT2006-90600
- [26] Fredrik Hermann, Per Hedemalm, Raik Orbay, Rolf Gabrielsson, Jens Klingmann 'Comparison of Combustion Properties between synthetic jet Fuel FT and conventional JetA1' GT2005-68540
- [27] IATA 2010 Report on Alternative Fuels
- [28] J.Kinder, T.Rahmes 'Evaluation of Bio-Derived Synthetic Paraffinic Kerosenes' 2009
- [29] B.E. Poling, J.M.Prausnitz, J.P O'Connell 'The Properties of Gases and Liquids'2004 Mc. Graw- Hill 5th edition, Chapter5
- [30] M.L. Huber, B.L.Smith, L.S.Ott, T.J.Bruno 'Surrogate Mixture Model for the Thermophysical Properties of Synthetic Aviation Fuel S-8:Explicit Application of the Advanced Distillation Curve' Energy & Fuels 2008,page 1107
- [31] L. Davis Clemens 1996 'Blending rules for formulated biodiesel fuel'
- [32] E.Alptekin, M.Canacki 'Determination of the density and the viscosities of biodiesel-diesel fuel blends'2008 Kocaeli,Turkey,Elsevier
- [33] Hong Yang, Zbigniew Ring, Yevgenia Briker, Norma McLean, Wally Friesen, Craig Fairbridge' Neural network prediction of cetane number and density of diesel fuel from its chemical composition determined by LC and GC-MS.'
- [34] E.W de Menezes ,R. da Silva,R. Cataluna,R.J.C Ortega 2005 ' Effects of ethers and ether/ethanol additives on the physiochemical properties of diesel fuel and on engine tests'Elsevier,Porto Alegre Brazil pages 817-818

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

Π1. Υπορουτίνα CEAPRO

Σκοπός της υπορουτίνας CEAPRO είναι να τροφοδοτήσει το CEA με τα απαραίτητα δεδομένα εισόδου. Τέτοια δεδομένα είναι η επιλογή αγνόησης του συμπυκνωμένου νερού, ο τρόπος υπολογισμού του λόγου νερού αέρα, η επιλογή διάστασης των προϊόντων της καύσης κτλ.

Κλήση: CALL CEAPRO(ibase,expdat,dayco,fuelvec1,ProdProps)Input: ibase, expdat, dayco, fuelvec1Output: ProdProps

Μεταβλητές:

Όνομα	Format (διάσταση)	Περιγραφή
ibase(i)	INTEGER*4 (5)	Περιεκτικότητα αντιδρώντων
ibase(1)	INTEGER*4	Τύπος προβλήματος (1= tp, 2=hp,3=sp)
ibase(2)	INTEGER*4	Αριθμός καυσίμων
ibase(3)	INTEGER*4	Θεώρηση χημικής διάστασης (1=πλήρης
		κάυση,2= διάσταση με 15προϊόντα,3= πλήρης
		διάσταση
ibase(4)	INTEGER*4	Αγνόηση ή όχι του συμπυκνωμένου νερού
		(1=Ox1, 2=Nai)
ibase(5)	INTEGER*4	Καθορισμός τρόπου υπολογιμού νερού αέρα
		(1=Με στοιχεία τυπικής ημέρας Τ=288Κ,
		P=1.012325 bar, RH=60%
		2=Με εισαγωγή πίεσης και θερμοκρασίας
		περιβάλλοντος
		3= Η τιμή war ορίζεται από το χρήστη)
expdat(i)	REAL*8 (6)	Υπολογισμός εκπομπών καυσαερίων
expdat(1)	REAL*8	Πίεση επίτευξης χημικής ισορροπίας (bar)
expdat(2)	REAL*8	Θερμοκρασία tp προβλήματος (K)
expdat(3)	REAL*8	Θερμοκρασία αέρα (hp προβλήματος) (K)
expdat(4)	REAL*8	Θερμοκρασία καυσίμου (hp προβλήματος)
		(K)
expdat(5)	REAL*8	Λόγος καυσίμου αέρα (far)
expdat(6)	REAL*8	Λόγος νερού αέρα (war)
dayco(i)	REAL*8(3)	Ορισμα εισόδου
dayco(1)	REAL*8	Θερμοκρασία περιβάλλοντος (Κ)

dayco(2)	REAL*8	Πίεση περιβάλλοντος (bar)
dayco(3)	REAL*8	Σχετική υγρασία (%)
fuelvec1(i)	REAL*8(200)	Ορισμα εισόδου
fuelvec1(1)	REAL*8	Είδος καυσίμου (1=CH ₄ , 2= Jet-A(g), 3=Jet-
		$A(L),4=$ υδρογονάνθρακας $C_mH_n,5=$ καύσιμο
		της μορφής $C_m H_n S_p O_q N_r$)
fuelvec1(2)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα του στοιχείου στο
		συνολικό καύσιμο (%)
fuelvec1(3)	REAL*8	Μορφή εισαγωγής δεδομένων (1=Επι τοις
		εκατό περιεκτικότητα κατά μάζα, 2= Λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα,
		3=Αριθμός ατόμων στοιχείο στο μόριο του
		καυσίμου
fuelvec1(4)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα C ή αριθμός
		ατόμων C στο μόριο του καυσίμου
fuelvec1(5)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Η ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Η στο μόριο του καυσίμου
fuelvec1(6)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα S ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων S στο μόριο του καυσίμου
fuelvec1(7)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Ο ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Ο στο μόριο του καυσίμου
fuelvec1(8)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Ν ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Ν στο μόριο του καυσίμου
fuelvec1(9)	REAL*8	Επιλογή εισαγωγής κατώτερης θερμογόνου
		δύναμης ή ενθαλπίας (1= LHV, 2=ενθαλπία
		σχηματισμού)
fuelvec1(10)	REAL*8	Τιμή κατώτερης θερμογόνου δύναμης ή
		ενθαλπίας σχηματισμού (kJ/kg)
	•••••	
fuelvec1(j)	REAL*8	Είδος καυσίμου j (1=CH ₄ , 2= Jet-A(g), 3=Jet-
		$A(L),4=$ иброуо νάνθρακας $C_mH_n,5=$ каύσιμο
		της μορφής $C_m H_n S_p O_q N_r$)
fuelvec1(j+1)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα του στοιχείου στο
		συνολικό καύσιμο j (%)
fuelvec1(j+2)	REAL*8	Μορφή εισαγωγής δεδομένων για καύσιμο j
		(1=Επι τοις εκατό περιεκτικότητα κατά μάζα,

		2= Λόγων υπολοίπων στοιχείων ως προς
		άνθρακα, 3=Αριθμός ατόμων στοιχείο στο
		μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+3)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα C ή αριθμός
		ατόμων C στο μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+4)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Η ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Η στο μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+5)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα S ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων S στο μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+6)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Ο ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Ο στο μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+7)	REAL*8	Περιεκτικότητα κατά μάζα Ν ή λόγων
		υπολοίπων στοιχείων ως προς άνθρακα ή
		αριθμός ατόμων Ν στο μόριο του καυσίμου j
fuelvec1(j+8)	REAL*8	Επιλογή εισαγωγής κατώτερης θερμογόνου
		δύναμης ή ενθαλπίας (1= LHV, 2=ενθαλπία
		σχηματισμού) καυσίμου j
fuelvec1(j+9)	REAL*8	Τιμή κατώτερης θερμογόνου δύναμης ή
		ενθαλπίας σχηματισμού (kJ/kg) καυσίμου j
Prodprops(i)	REAL*8(20)	Ορισμα εξόδου
Prodprops(1)	REAL*8	λόγος ισοδυναμίας καυσίμου Φ
Prodprops(2)	REAL*8	Πίεση (bar)
Prodprops(3)	REAL*8	Θερμοκρασία (Κ)
Prodprops(4)	REAL*8	Πυκνότητα (kg/m ³)
Prodprops(5)	REAL*8	Ενθαλπία (kJ/kg)
Prodprops(8)	REAL*8	Εντροπία (kJ/kgK)
Prodprops(9)	REAL*8	Μοριακό βάρος
Prodprops(10)	REAL*8	Συντελεστής C_p
Prodprops(11)	REAL*8	Ισεντροπικός εκθέτης γ
Prodprops(12)	REAL*8	Σταθερά αερίου R
Prodprops(14)	REAL*8	Δυναμική συνεκτικότητα (milipoise)
L		

Στη συνέχεια παρουσιάζεται το λογικό διάγραμμα της υπορουτίνας CEAPRO.




Π2. Βιβλιοθήκη CEA_funcsfluid

Η βιβλιοθήκη CEA_funcsfluid περιέχει συνολικά εφτά συναρτήσεις, πέντε για τον ευθύ υπολογισμό μεγεθών και δύο για τον αντίστροφο. Οι πέντε πρώτες υπολογίζουν την ειδική ενθαλπία, την εντροπία ,τη σταθερά αερίων, τον ισεντροπικό εκθέτη γ και τη δυναμική συνεκτικότητα με δεδομένα τη θερμοκρασία, το λόγο καυσίμου- αέρα, το λόγο νερού –αέρα, και την πίεση Η έκτη υπολογίζει τη θερμοκρασία με δεδομένα την ειδική ενθαλπία, το λόγο καυσίμου-αέρα, το λόγο νερού-αέρα και την πίεση και η έβδομη υπολογίζει την θερμοκρασία με δεδομένα την εντροπία το λόγο καυσίμου-αέρα, το λόγο νερού-αέρα και την πίεση.

Για τις πέντε πρώτες συναρτήσεις :

Kλήση: ZZZ = CEA_XXX_YYY(T,FARB,WAR,P)

Όπου ΧΧΧ_ΥΥΥ:

XXX_YYY	ZZZ	Συνάρτηση
h_T	Н	Ειδική ενθαλπία (J/kg)
phi_T	phi	Εντροπία (J/kgK)
gam_T	gam	Ισεντροπικός εκθέτης γ
R_FARB	R	Σταθερά αερίου
mu_T	mu	Δυναμική συνεκτικότητα (Pa*s)

Input: T, FARB, WAR, P **Output:** h, phi, gam, R, mu

Μεταβλητές:

Όνομα	Format (Διάσταση)	Περιγραφή μεταβλητής
Т	REAL*8	Θερμοκρασία (Κ)
FARB	REAL*8	Λόγος καυσίμου-αέρα
WAR	REAL*8	Λόγος νερού-αέρα
Р	REAL*8	Πίεση (Pa)

Για τις αντίστροφες συνατήσεις:

Κλήση: $T = CEA_T_h(h, FARB, WAR, P)$

Input: h, FARB, WAR, P Output: T

Μεταβλητές:

Όνομα	Format (Διάσταση)	Περιγραφή μεταβλητής
h	REAL*8	Ειδική ενθαλπία (J/kgK)
FARB	REAL*8	Λόγος καυσίμου-αέρα
WAR	REAL*8	Λόγος νερού-αέρα
Р	REAL*8	Πίεση επίτευξης χημικής ισορροπίας (bar)

Κλήση: $T = CEA_T_phi(phi, FARB, WAR, P)$

Input: phi, FARB, WAR, P **Output:** T

Μεταβλητές:

Όνομα	Format (Διάσταση)	Περιγραφή μεταβλητής
phi	REAL*8	Εντροπία (J/kgK)
FARB	REAL*8	Λόγος καυσίμου-αέρα
WAR	REAL*8	Λόγος νερού-αέρα
Р	REAL*8	Πίεση επίτευξης χημικής ισορροπίας (bar)