

1.1 Теплоёмкость

1.1.1 Молярная теплоёмкость вещества при постоянном давлении

Обозначение: c_{pj}^0

Единицы измерения: $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$

1.1.1.1 Gordon S., McBride B.J.¹

Исходная информация в виде коэффициентов полинома являются справочными данными.

$$c_{pj}^0 = R (a_{1j}T^{-2} + a_{2j}T^{-1} + a_{3j} + a_{4j}T + a_{5j}T^2 + a_{6j}T^3 + a_{7j}T^4),$$

$$c_{pj}^0 = R \sum_{i=1}^7 a_{ij} T^{i-3},$$

где: $R = 8.31415 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} \right]$ - универсальная газовая постоянная.

1.1.2 Массовая теплоёмкость вещества при постоянном давлении

Обозначение: c_{pj}

Единицы измерения: $\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$

1.1.2.1 Gordon S., McBride B.J.¹

Связь молярной и массовой теплоёмкости при постоянном давлении выглядит следующим образом:

$$c_{pj} = \frac{c_{pj}^0}{M_j}, \text{ или}$$

$$c_{pj} = \frac{R}{M_j} (a_{1j}T^{-2} + a_{2j}T^{-1} + a_{3j} + a_{4j}T + a_{5j}T^2 + a_{6j}T^3 + a_{7j}T^4), \text{ или}$$

$$c_{pj} = \frac{R}{M_j} \sum_{i=1}^7 a_{ij} T^{i-3},$$

где: M_j - молярный вес вещества $\left[\frac{\text{кг}}{\text{кмоль}} \right]$,

¹ Gordon S., McBride B.J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications // Oct. 1994, NASA RP-1311

$R = 8314.15 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{кмоль} \cdot \text{К}} \right]$ - универсальная газовая постоянная.

1.2 Вязкость

1.2.1 Динамическая вязкость газа

Обозначение: μ_j

Единицы измерения: $\text{Па} \cdot \text{с}$

1.2.1.1 Gordon S., McBride B.J.¹

Исходная информация в виде коэффициентов полинома являются справочными данными.

$$\mu_j = \exp \left(a_1 \ln T + \frac{a_2}{T} + \frac{a_3}{T^2} + a_4 \right) \left[\mu\text{P} - \text{микропуаз} \right],$$

$$\mu_j = 10^{-7} \exp \left(a_1 \ln T + \frac{a_2}{T} + \frac{a_3}{T^2} + a_4 \right) \left[\text{Па} \cdot \text{с} \right].$$

1.2.2 Кинематическая вязкость газа

Обозначение: ν_j

Единицы измерения: $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$

Формула для расчёта кинематической вязкости газа:

$$\nu_j = \frac{\mu_j}{\rho_j}.$$

1.3 Теплопроводность

Обозначение: λ_j

Единицы измерения: $\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$

1.3.1 Gordon S., McBride B.J.¹

Исходная информация в виде коэффициентов полинома являются справочными данными.

$$\lambda_j = \exp \left(a_1 \ln T + \frac{a_2}{T} + \frac{a_3}{T^2} + a_4 \right) \left[\frac{\mu\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}} \right],$$

$$\lambda_j = 10^{-4} \exp \left(a_1 \ln T + \frac{a_2}{T} + \frac{a_3}{T^2} + a_4 \right) \left[\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}} \right].$$

2 ПРИЛОЖЕНИЯ

2.1 Формат базы данных по термодинамическим свойствам веществ (CREK)

Файл terdat.dat

Запись / строка	Значение	Формат	Колонка
Заголовок файла / 1	THERMO	A6	1-6
Заголовок файла / 2	Диапазон температур	3F10.3	1-30
Запись для вещества / 1	Название	3A4	1-12
	Комментарий	2A3	19-24
	4(Название атома и кол-во атомов)	4(A2,F3.0)	25-44
	Фазовое состояние (G)	A1	45
	Верхний и нижний диапазон температурного интервала	2F10.3	46-65
Запись для вещества / 2	Номер строки	I15	66-80
	Первые пять коэффициентов c_p^0/R первого интервала температур	5D15.8	1-75
Запись для вещества / 3	Номер строки	I5	76-80
	Два последних коэффициента c_p^0/R первого интервала температур	2D15.8	1-30
	Три первых коэффициента c_p^0/R второго интервала температур	3D15.8	31-75
Запись для вещества / 4	Номер строки	I5	76-80
	Четыре последних коэффициента c_p^0/R второго интервала температур	4D15.8	1-60
Запись для вещества / 4	Номер строки	I5	61-80

2.2 Формат базы данных по термодинамическим и переносным свойствам веществ (CEA)

Файл thermo.inp

Запись / строка	Значение	Формат	Колонка
Запись для вещества / 1	Формула вещества	A24	1-24
	Комментарий	A56	25-80
Запись для вещества / 2	Число температурных интервалов	I2	1-2
	Идентификационный код	A6	4-9
	5(Химический элемент и его количество)	5(A2,F6.2)	11-50
	Ноль для газа и не ноль для другой фазы	I1	52
	Молекулярный вес	F13.5	53-65
Запись для вещества / 3	Теплота образования при 298,15 К (Дж/моль)	F13.5	66-80
	Температурный интервал	2F10.3	2-21
	Число коэффициентов для c_p^0/R	I1	23
Запись для вещества / 4	Показатели степени при T в выраж. для c_p^0/R	8F5.1	24-63
	$H(298.15)-H(0)$, (Дж/моль)	F15.3	66-80
Запись для вещества / 4	Пять первых коэффициентов для c_p^0/R	5D16.8	1-80
Запись для вещества / 5	Последние три коэффициента для c_p^0/R	3D16.8	1-48
	Константы b_{i1}, b_{i2} - константы интегрирования	2D16.8	49-80

	с учётом энтальпии образования при 298,15К.		
...	Повторение строк 3-5 для других интервалов T		

Файл trans.inp

Запись / строка	Значение	Формат	Колонка
Запись для вещества / 1(а)	Формула вещества	A15	1-15
	Формула второго вещества для коэффициента взаимодействия	A15	17-31
	V если запись для вязкости или коэффициента взаимодействия	A1	35
	Количество температурных интервалов V(0-3)	I1	36
	C если запись для теплопроводности	A1	37
	Количество температурных интервалов C(0-3)	I1	38
	Комментарий (Ссылка, дата)	A40	41-80
Запись для вещества / 1-б(б)	V если далее запись для вязкости или коэффициента взаимодействия	A1	2
	C если далее запись для теплопроводности	A1	2
	Начальное и конечное значение температурного интервала	2F9.2	3-20
	Коэффициенты $a_1 - a_4$	4F15.8	21-80