

13. F. D. Rossini, D. D. Hagman et al. Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties.—U.S. N. B. S., Circular 500, Washington, 1952.
14. В. И. Бабий, И. П. Иванова. Теплоэнергетика, 1965, 9.
15. P. Eisenklam and S. A. Arunachalam. Comb. and Flame., 1966, 10, 2, 171.
16. D. B. Spalding. Fuel, 1951, 30, 6, 121.
17. Я. Г. Зельдович. Теория горения и детонации газов. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1944.
18. Н. Н. Бахман, А. Ф. Беляев. Докл. АН СССР, 1960, 133, 4, 866.

УДК 536.46+662.612

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ В ЗАМКНУТОМ ПЕРЕМЕННОМ ОБЪЕМЕ ПРИ ПОДВОДЕ ВЕЩЕСТВА

Б. Т. Ерохин, Ю. И. Федоров

(Москва)

В настоящей статье предложена модель расчета нестационарного периода с учетом дожигания продуктов горения конденсированной системы в кислороде воздуха, находящегося в замкнутом объеме.

Математическая модель построена также с учетом взаимодействия в полужамкнутом объеме и изменяющемся во времени замкнутом объеме (см. рисунок).

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА

В соответствии с постановкой задачи принималось, что в замкнутом объеме находится реагирующая смесь, состоящая из воздуха и продуктов горения конденсированной системы. Для диссоциированной смеси принималось, что компоненты газовой смеси идеальны и их термодинамические функции I и S , теплоемкости при постоянном давлении и объеме c_p , c_v и константы равновесия k не зависят от давления. Принималось также, что параметры процесса осреднены по свободному объему.

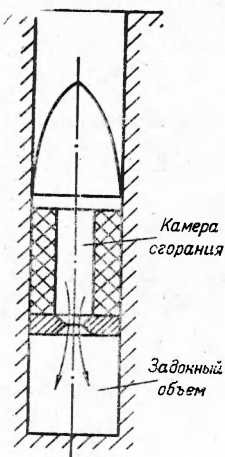
Опустив промежуточные выкладки, метод расчета воспламенительного периода представим в виде следующих соотношений.

Уравнение сохранения вещества (для продуктов горения первой к-системы)

$$\dot{G}_{\text{вк}} = 3\omega_{\text{вн}}(1-Z)^2\dot{Z}\delta(1-Z) - g_{\text{вк}}\dot{Y}.$$

Под δ здесь и далее подразумевается единичная функция. Здесь

$$\dot{Z} = \frac{u_{\text{вн}} p_{\text{вн}}}{l_{\text{вн}}}, \quad g_{\text{вк}} = \frac{G_{\text{вк}}}{G_{\text{вк}} + G_{\text{тк}} + G_{\text{вдк}}} —$$



относительная весовая доля продуктов горения первой к-системы в объеме A .

$$\dot{Y} = \delta(p_k - p^*) \left\{ \begin{aligned} & \Gamma(k) \varphi_p F_{кр} V \sqrt{p_k \rho_k} \delta\left(p_k - \frac{p_3}{\beta}\right), \\ & \varphi_p F_{кр} \sqrt{\frac{2k}{k-1} p_k \rho_k \left[\left(\frac{p_3}{p_k}\right)^{2/k} - \left(\frac{p_3}{p_k}\right)^{\frac{k+1}{k}} \right] \cdot \delta\left(\frac{p_3}{\beta} - p_k\right)}, \\ & \beta = \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}. \end{aligned} \right.$$

Уравнение сохранения вещества (для продуктов горения второй к-системы ТТ)

$$G_{тк} = u_1 p^* \rho_{тп} \left[\frac{S_m}{\pi} \delta(T_{п} - T^*) + x_k d \delta(T_{п} - T^*) + \frac{S_{тз}}{\pi} \delta(x_k - l) \right] - g_{тк} \dot{Y},$$

где $g_{кт} = \frac{G_{тк}}{G_{тк} + G_{вк} + G_{вдк}}$ — относительная весовая доля продуктов горения ТТ.

Уравнение сохранения вещества (для воздуха):

$$\dot{G}_{вдк} = -g_{вдк} \dot{Y},$$

где

$$g_{вдк} = \frac{G_{вдк}}{G_{тк} + G_{вк} + G_{вдк}}.$$

Соотношения, определяющие секундный приход продуктов горения первой и второй к-систем в объем Б:

$$\dot{G}_{тз} = g_{тк} \cdot \dot{Y},$$

$$\dot{G}_{вз} = g_{вк} \cdot \dot{Y}.$$

Соотношение, определяющее изменение температуры поверхности второй к-системы в передней части

$$\dot{T}_{п} = \frac{\alpha_0^2 (T - T_{п})^2}{\bar{G}_{тп} \lambda_{тп} (T_{п} - T_0)},$$

где

$$\alpha_0 = N_3 \left(\frac{G_{\Sigma} d c_p}{F \lambda} \right)^{m_1} \frac{\lambda}{d};$$

$\dot{G}_{\Sigma}$ — суммарный секундный приход продуктов горения первой и второй к-систем

$$\begin{aligned} \dot{G}_{\Sigma} = u_1 p^* \rho_{тп} \left[\frac{S_{тп}}{\pi} \delta(T_{п} - T^*) + x_k d \delta(T_{п} - T^*) + \frac{S_{тз}}{\pi} \delta(x_k - l) \right] + \\ + 3\omega_{вн} (1 - Z)^2 \dot{Z} \delta(1 - Z). \end{aligned}$$

Здесь

$$x_k = d \left[\left(\frac{Q}{Q^*} \right)^{\frac{1}{m_0}} - 1 \right].$$

Соотношение для изменения удельного теплового потока, транспортируемого от продуктов горения к поверхности второй к-системы

$$\dot{q}_0 = \alpha_0 (T - T_{п}).$$

Уравнение, характеризующее изменение объема Б

$$\frac{dV}{dt} \delta(-\dot{V}) = \left\{ [-V\dot{Y} - F_{\text{тр}} + F_a(p_3 - p_{\text{ат}})] \frac{1}{M} - g \right\} + \frac{R}{M} \delta(-\dot{V}),$$

где

$$V = \frac{dx}{dt}.$$

Приведенная система дифференциальных уравнений численно интегрируется методом Рунге — Кутты относительно неизвестных

$$Z, G_{\text{вк}}, G_{\text{тк}}, G_{\text{вдк}}, G_{\text{тз}}, G_{\text{вз}}, T_{\text{п}}, Q, V, x.$$

Неизвестные параметры p_k, p_3, T_k, T_3 могут быть определены из уравнений состояния и энергии:

а) для объема А

$$p_k = \frac{RT_k G_{\text{смк}}}{\mu_k V_k},$$

$$I_{\text{смк}} - I_{\text{смгк}} - \int_{p_{\text{нк}}}^{p_k(t)} V_k(t) dp = 0,$$

$$V_k = \text{const};$$

б) для объема Б

$$p_3 = \frac{RT_3 G_{\text{смз}}}{\mu_3 V_3},$$

$$I_{\text{смз}} - I_{\text{смгз}} - \int_{p_{\text{нз}}}^{p_3(t)} V_3(t) dp = 0,$$

$$V_3(t) = V_{3\text{н}} = \frac{\pi D^4}{4} x,$$

где $I_{\text{смк}} = I_{\text{вдк}} G_{\text{вдк}} + I_{\text{в}} G_{\text{вк}} + I_{\text{г}} G_{\text{тк}}$ — энтальпия смеси первой и второй к-систем и объеме А до момента химического взаимодействия; $I_{\text{смгк}}$ — энтальпия смеси первой и второй к-системы и воздуха в объеме А после химического взаимодействия; $I_{\text{смз}} = I_{\text{вдз}} G_{\text{вдз}} + I_{\text{в}} G_{\text{вз}} + I_{\text{г}} G_{\text{тз}}$ — энтальпия смеси первой и второй к-систем и в объеме Б до момента химического взаимодействия; $I_{\text{смгз}}$ — энтальпия первой и второй к-систем и объеме Б после химического взаимодействия.

Применяя метод Ньютона, можно по указанным уравнениям определить неизвестные параметры p_k, p_3, T_k, T_3 . При этом для лучшей сходимости метода начальные приближения для неизвестных параметров выбираются из предыдущего шага.

Для удобства обозначим:

$$f_1(p, T) = I_{\text{смк}} - I_{\text{смгк}} - \int_{p_{\text{нк}}}^{p_k(t)} V_k(t) dp,$$

$$f_2 = I_{\text{смз}} - I_{\text{смгз}} - \int_{p_{\text{нз}}}^{p_3(t)} V_3(t) dp,$$

$$f_3 = p_k - \frac{RT_k G_{\text{смк}}}{\mu_k V_k},$$

$$f_4 = p_3 - \frac{RT_3 G_{\text{смз}}}{\mu_3 V_3}.$$

Тогда

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} = -\frac{\partial I_{\text{смк}}}{\partial T} = -c_{p\rho p_k}; \quad \frac{\partial f_2}{\partial T} = -c_{p\rho p_3};$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_1}{\partial p} &= -V_K(t); \quad \frac{\partial f_4}{\partial p} = 1; \\
\frac{\partial f_3}{\partial T} &= -\left(\frac{RG_{\text{смк}}}{\mu_K V_K} - \frac{RT_K G_{\text{смк}}}{\mu_K^2 V_K} \frac{\partial \mu_K}{\partial T} \right); \\
\frac{\partial f_2}{\partial p} &= -V_3(t); \quad \frac{\partial f_3}{\partial p} = 1; \\
\frac{\partial f_4}{\partial T} &= -\left(\frac{RG_{\text{мз}}}{\mu_3 V_3} - \frac{RT_3 G_{\text{смз}}}{\mu_3^2 V_3} \frac{\partial \mu_3}{\partial T} \right); \\
f_1(p_{\text{кп}+1}, T_{\text{кп}+1}) &= f_1(T_{\text{кп}}, p_{\text{кп}}) + \frac{\partial f_1}{\partial p} \Delta p_K + \frac{\partial f_1}{\partial T} \Delta T_K; \\
f_3(p_{\text{кп}+1}, T_{\text{кп}+1}) &= f_3(T_{\text{кп}}, p_{\text{кп}}) + \frac{\partial f_3}{\partial p} \Delta p_K + \frac{\partial f_3}{\partial T} \Delta T_K; \\
f_2(p_{\text{зп}+1}, T_{\text{зп}+1}) &= f_2(p_{\text{зп}}, T_{\text{зп}}) + \frac{\partial f_2}{\partial p} \Delta p_3 + \frac{\partial f_2}{\partial T} \Delta T_3; \\
f_4(p_{\text{зп}+1}, T_{\text{зп}+1}) &= f_4(p_{\text{зп}}, T_{\text{зп}}) + \frac{\partial f_4}{\partial p} \Delta p_3 + \frac{\partial f_4}{\partial T} \Delta T_3.
\end{aligned}$$

Таким образом, получаем систему для определения поправок.

$$0 = f_1(p_{\text{кп}}, T_{\text{кп}}) + \frac{\partial f_1}{\partial p} \Delta p_K + \frac{\partial f_1}{\partial T} \Delta T_K;$$

$$0 = f_3(p_{\text{кп}}, T_{\text{кп}}) + \frac{\partial f_3}{\partial p} \Delta p_K + \frac{\partial f_3}{\partial T} \Delta T_K;$$

$$0 = f_2 + \frac{\partial f_2}{\partial p} \Delta p_3 + \frac{\partial f_2}{\partial T} \Delta T_3;$$

$$0 = f_4 + \frac{\partial f_4}{\partial p} \Delta p_3 + \frac{\partial f_4}{\partial T} \Delta T_3;$$

$$\Delta T_3 = \frac{f_4 \frac{\partial f_2}{\partial p} - f_2 \frac{\partial f_4}{\partial p}}{\frac{\partial f_2}{\partial T} \frac{\partial f_4}{\partial p} - \frac{\partial f_4}{\partial T} \frac{\partial f_2}{\partial p}};$$

$$\Delta p_3 = \frac{f_4 \frac{\partial f_2}{\partial p} - f_2 \frac{\partial f_4}{\partial p}}{\frac{\partial f_2}{\partial T} \frac{\partial f_4}{\partial p} - \frac{\partial f_4}{\partial T} \frac{\partial f_2}{\partial p}};$$

$$\Delta T_K = \frac{f_3 \frac{\partial f_1}{\partial p} - f_1 \frac{\partial f_3}{\partial p}}{\frac{\partial f_1}{\partial T} \frac{\partial f_3}{\partial p} - \frac{\partial f_3}{\partial T} \frac{\partial f_1}{\partial p}};$$

$$\Delta p_K = \frac{f_3 \frac{\partial f_1}{\partial T} - f_1 \frac{\partial f_3}{\partial T}}{\frac{\partial f_1}{\partial p} \frac{\partial f_3}{\partial T} - \frac{\partial f_3}{\partial p} \frac{\partial f_1}{\partial T}};$$

Для определения поправок необходимо найти μ_K ; μ_3 ; $I_{\text{смгз}}$; c_{pp_3} ; c_{pp_K} ; $I_{\text{смк}}$, для чего нужно проводить термодинамический расчет.

Запишем систему уравнений, характеризующую химическое равно-

весие гомогенной диссоциированной смеси при $p = \text{const}$ и $T = \text{const}$:

$$\ln p_j - \sum_{i=1}^m a_{ij} \ln p_{A(i)} + \ln K_j = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, l) -$$

уравнение диссоциации в логарифмической форме;

$$\ln \sum_{j=1}^{l+m} a_{ij} n_j - \ln M_{\text{см}} - \ln b_{i\text{см}} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m) -$$

уравнение сохранения вещества в логарифмической форме;

$$\ln \sum_{j=1}^{l+m} p_j - \ln p = 0 -$$

уравнение Дальтона.

Логарифм константы равновесия по парциальным давлениям для реакции диссоциации j -го компонента на атомы определяется по соотношению

$$\ln K_j = \frac{\sum_{i=1}^m a_{ij} S_A(i) - S_j^0}{R_0} - \frac{\sum_{i=1}^m a_{ij} I_A(i) - I_j}{R_0 T},$$

где a_{ij} — число атомов i -го химического элемента в компоненте; $b_{i\text{см}}$ — количество атомов i -го химического элемента в эквивалентной формуле исходного вещества; S^0 — стандартная энтропия; p_j — парциальное давление; n_j — число молей j -го газообразного компонента в $M_{\text{см}}$ — число молей исходного вещества; $p_j = n_j$.

Для объема A $b_{i\text{см}A} = g_{\text{тк}} b_{\text{т}i} + g_{\text{вк}} b_{\text{в}i} + g_{\text{вдк}} b_{\text{вд}i}$,

для объема B $b_{i\text{см}B} = g_{\text{тз}} b_{\text{т}i} + g_{\text{вз}} b_{\text{в}i} + g_{\text{вдз}} b_{\text{вд}i}$,

где $b_{\text{т}i}$, $b_{\text{в}i}$, $b_{\text{вд}i}$ — коэффициенты в эквивалентных формулах для первой и второй к-систем и воздуха.

После определения состава находим энтальпию продуктов сгорания

$$I_{\Gamma} = \frac{\sum_{j=1}^{l+m} n_j I_j}{M_{\text{см}} \mu_{\Gamma}},$$

$$I_{\text{см}\Gamma} = G_{\text{см}} \left[\left(1 - \sum_{j=1}^h Z_j \right) I_{\Gamma} + \sum_{j=1}^h Z_j I_j \right],$$

где I_j задаются в виде полиномов. Равновесную теплоемкость при постоянном давлении и при постоянном объеме можно определить по соотношениям

$$c_{pp} = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\sum_{j=1}^{l+m} n_j I_j}{M_{\text{см}} \mu_{\text{см}}} \right] \left(1 - \sum_{j=1}^h Z_j \right) + \sum_{j=1}^h Z_j c_{pj};$$

$$c_{pp\Gamma} = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\sum_{j=1}^{l+m} n_j I_j}{\mu_{\text{см}} M_{\text{см}}} \right]; \quad c_{vp} = c_{pp} - \frac{R}{\mu_0} \frac{\left[1 - \left(\frac{\partial \ln M_{\text{см}}}{\partial \ln T} \right)_p \right]^2}{\left(\frac{\partial \ln M_{\text{см}}}{\partial \ln p} \right)_T};$$

$$c_{pv_r} = c_{pp_r} - \frac{R}{\mu} \frac{\left[1 - \left(\frac{\partial \ln M_{cm}}{\partial \ln T}\right)_p\right]^2}{\left(\frac{\partial \ln M_{cm}}{\partial \ln p}\right)_T}.$$

Замороженную теплоемкость можно определить:

$$c_{p3} = \frac{\sum_{j=1}^{l+m_0} n_j c_{ps}}{M_T \mu_T} \left(1 - \sum_{j=1}^h Z_j\right) + \sum_{j=1}^h c_{p3j} Z_j,$$

$$c_{v3} = c_{v3} - R.$$

Скорость звука можно записать в виде:

$$\alpha^2 = \frac{K_p RT}{\mu \left(\frac{\partial \ln M_{cm}}{\partial \ln p}\right)}; \quad a_3^2 = \frac{K_3 RT}{\mu},$$

где Z_j — относительная весовая доля j -конденсата.

Коэффициент теплопроводности смеси

$$\lambda_{cm} = \lambda'_{cm} + \lambda''_{cm},$$

где

$$\lambda'_{cm} = \frac{\sum_{i=1}^g \lambda_i x_i}{\sum_{j=1}^r \psi_{ji} x_j}; \quad \psi_{ij} = \varphi_{ij} \frac{1 + 2,41(\mu_i - \mu_j)(\mu_i - 0,142\mu_j)}{(\mu_i + \mu_j)^2};$$

$$\varphi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j}\right)^{0,5} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i}\right)^{0,25}\right]^2}{2\sqrt{2} \left(1 + \frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{0,5}}; \quad \lambda''_{cm} = \sum_{i=1}^g \frac{\lambda_i'' x_i}{\sum_{s=1}^r \frac{D_{is} x_s}{D_{is}}};$$

x_i — мольная доля i -го компонента;

$$\lambda_i' = \frac{15 R_0}{4 \mu_i} \eta_j; \quad \eta_j = 26,7 \times 10^{-7} \frac{\sqrt{\mu_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_i^{2,2}};$$

μ_i — молекулярный вес компонента; $\Omega_i^{2,2}$ — приведенный интеграл столкновений; σ_{ij} — параметры потенциальной функции столкновений;

$$\lambda_i'' = 0,885 \left(0,4 \frac{c_{pi}}{R_0} - 1\right) \lambda_i; \quad D_{ij} = 0,26^{-6} \frac{\sqrt{\frac{T^3 (\mu_i + \mu_j)}{2 \mu_i \mu_j}}}{\rho \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{1,1}}.$$

Таким образом, дан математический метод расчета параметров с учетом дожигания продуктов горения в кислороде воздуха в замкнутом объеме.

Поступила в редакцию
20/V 1971