

ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ ИЗОЭНТРОПЫ ХИМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНОГО ГАЗА

П. А. Фомин, А. В. Троцюк

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,
630090 Новосибирск

Предложен приближенный метод расчета изэнтропии идеального химически равновесного газа. Сделан анализ применимости традиционно используемой для этой цели приближенной модели.

Точный расчет изэнтропии химически равновесного газа не представляет принципиальных трудностей [1, 2]. Тем не менее, он часто бывает неудобен своей громоздкостью и большим числом побочных результатов, не используемых в газодинамических расчетах. Поэтому большое распространение при моделировании изэнтропических течений химически равновесных газов получила модель инертного газа с постоянными молекулярной массой μ и показателем адиабаты γ и адиабатической связью между давлением p и плотностью ρ вида $p/\rho^\gamma = \text{const}$ (см., например, [3]). Указанная приближенная модель позволяет значительно сократить объем вычислений и упростить анализ результатов по сравнению с точными расчетами. К существенным недостаткам подобных моделей относятся произвол в выборе констант и низкая точность в широком диапазоне изменения параметров газа.

В настоящей работе предложен простой и обладающий высокой точностью приближенный способ расчета изэнтропии идеального химически равновесного газа. Проанализирована возможность использования для этих целей модели инертного газа с постоянным показателем адиабаты.

Далее приняты следующие обозначения: ρ, p, T, μ, U — плотность, давление, температура, молекулярная масса и удельная внутренняя энергия газа соответственно; $\mu_a, \mu_{\min}, \mu_{\max}$ — молекулярные массы газа в атомарном, предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях; E — средняя энергия диссоциации продуктов реакции; K_+, A — константы скоростей рекомбинации и диссоциации обобщенных продуктов реакции; S — энтропия; Θ — характерная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул; γ — показатель адиабаты; R — универсальная газовая постоянная.

Запишем первое начало термодинамики с учетом условия адиабатичности

$$dU + p d(1/\rho) = 0. \quad (1)$$

Уравнения химического равновесия позволяют представить молекулярную массу, как функцию T и ρ :

$$\mu = \mu(T, \rho), \quad (2)$$

а удельную внутреннюю энергию, как

$$U = U(T, \mu). \quad (3)$$

Уравнения (1), (2) совместно с (3) и уравнением состояния идеального газа

$$p = \rho RT/\mu \quad (4)$$

позволяют получить следующую изобарическую связь между T и ρ :

$$\frac{dT}{d\rho} = \varphi(T, \rho) = - \frac{U_\mu \mu_\rho - \frac{RT}{\rho} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)}{U_T + U_\mu \mu_T} \quad (5)$$

(индексами обозначены производные по соответствующим переменным). Используя (1) и (4), формулу (5) можно переписать и в переменных p , ρ или p , T .

Из (2)–(5) легко находится и выражение для расчета показателя равновесной изобары γ_e (последняя часть формулы получена в [4]):

$$\begin{aligned} \gamma_e &= \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho} \right) - 1 + \frac{\rho}{T} \left(1 - \frac{T}{\mu} \mu_T \right) \frac{dT}{d\rho} - \frac{\rho}{\mu} \mu_\rho = \\ &= 1 + \frac{R}{\mu} \frac{1 - \frac{T}{\mu} \mu_T - \frac{\rho}{R} \mu_\rho U_T - \frac{\rho}{RT} U_T \mu_\rho}{U_T + U_\mu \mu_T}. \end{aligned} \quad (6)$$

Для получения конкретных формул расчета равновесной изобары воспользуемся приближенной моделью химического равновесия [4–7], согласно которой зависимости (2), (3) имеют вид

$$\mu = \frac{B \mu_{\min} - 2 \mu_{\max} + \left((B \mu_{\min} - 2 \mu_{\max})^2 + 4(B-1) \mu_{\max}^2 \right)^{1/2}}{2(B-1)}, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} B &= \frac{AT^{3/4}}{4K_+} \left(1 - e^{-\Theta/T} \right)^{3/2} e^{-E/(RT)} \frac{\mu_{\max}^2}{\mu_{\min} \rho}, \\ U &= \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\Theta/T}{e^{\Theta/T} - 1} \right] \frac{RT}{\mu} + E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда легко получаются конкретные (правда, несколько громоздкие) формулы для расчета входящих в (5), (6) производных. Отметим в качестве одного из достоинств модели (5)–(8) отсутствие произвола в выборе входящих в нее констант.

Расчеты по (5)–(8) проведены для водородокислородной ($2H_2 + O_2$) и углеводородокислородной ($C_2H_2 + 2,5O_2$) смесей. Численные значения использованных констант (см. [3–6]) следующие: $\Theta = 4000$ К, $K_+ = 6 \cdot 10^8$ м⁶/(кмоль²·с); для смеси $2H_2 + O_2$: $E = 459,2$ кДж/моль, $\mu_{\min} = \mu_a = 6,005$, $\mu_{\max} = 18,02$, $A = 5,091 \cdot 10^{10}$ м³/(кмоль·с·К^{3/4}); для $C_2H_2 + 2,5 O_2$: $E = 492,9$ кДж/моль, $\mu_{\min} = 15,15$, $\mu_a = 11,8$, $\mu_{\max} = 35,35$, $A = 25,85 \cdot 10^{10}$ м³/(кмоль·с·К^{3/4}). Сравнение полученных результатов с соответствующими точными расчетами [1, 2] показывает высокую (лучше 1 %) точность предложенного в настоящей работе метода.

Результаты расчетов по (5)–(8) для смеси $2H_2 + O_2$ представлены на рис. 1–3 ($\rho_* = 0,9$ кг/м³). Кривые, относящиеся к одному и тому же расчету, снабжены одинаковыми порядковыми номерами. Видно, что в рассматриваемом диапазоне изменения параметров использование модели $p/\rho^\gamma = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$ для расчета изобар стехиометрической водородокислородной смеси возможно в следующих случаях:

- 1) при расширении газа с достаточно низкой (≤ 600 К) температурой (изменение γ_e при этом не превышает 0,02);
- 2) при расширении газа с начальной температурой ≈ 2500 К и плотностью ρ_* (γ_e при этом меняется не более, чем на 0,02 (кривая 5 на рис. 1, 3));

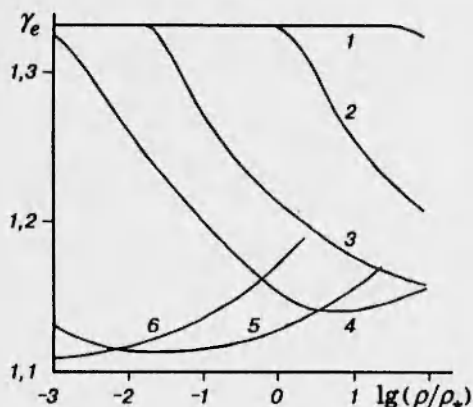


Рис. 1.

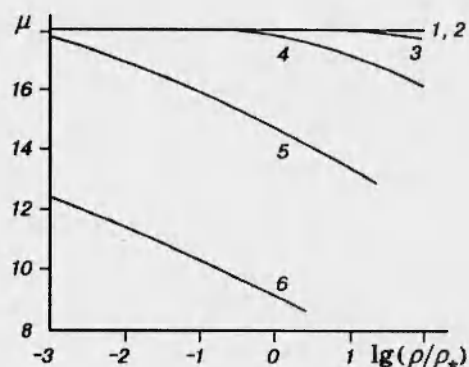


Рис. 2

3) при достаточно умеренных (до двух раз) изменениях плотности газа (изменение γ_e при этом не превышает 0,02). Указанным условиям, как правило, удовлетворяют изоэнтропические волны сжатия и разрежения в высокоскоростных высокотемпературных газовых потоках за фронтом волны газовой детонации в трубах и в стволах установок по детонационно-газовому нанесению покрытий.

Отметим, что область применимости предположения $\mu = \text{const}$ для описания изоэнтропы рассматриваемой смеси не включает условие 2 и несколько уже, чем в условиях 1 и 3 (см. рис. 2).

В остальных случаях, отличных от перечисленных, использование модели $p/\rho^\gamma = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$ для описания химически равновесной изоэнтропы этого газа в рассматриваемом диапазоне параметров может приводить к существенным ошибкам. Это относится, в частности, к моделированию пузырьковой детонации и расчету разлета продуктов детонации (явлений, в которых диапазон изменения плотности составляет несколько порядков, а температуры — несколько тысяч градусов). Как показывают расчеты по (5)–(8), аналогичные замечания о моделировании пузырьковой детонации и разлета продуктов детонации справедливы для широкого диапазона водородо- и углеводородокислородных смесей.

В заключение укажем, что частично рассматриваемые в настоящем сообщении вопросы рассматривались в [8], а предложенная выше модель уже использована в [9, 10] для описания изоэнтропического сжатия химически равновесного газа в волне пузырьковой детонации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Eisen C., Gross R., Rivlin T. Theoretical calculation of gaseous detonation // *Combust. Flame*. 1960. V. 4, N 2.
2. Николаев Ю. А., Топчий М. Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // *Физика горения и взрыва*. 1977. Т. 13, № 3. С. 393–404.

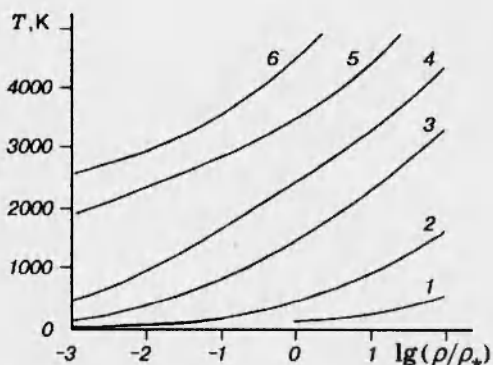


Рис. 3.

3. Станюкович К. П. Неустановившиеся движения сплошной среды. М.: Наука, 1971.
4. Николаев Ю. А. Модель кинетики химических реакций при высоких температурах // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14, № 4. С. 73–76.
5. Николаев Ю. А., Фомин П. А. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 1. С. 66–72.
6. Николаев Ю. А., Фомин П. А. Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ — конденсированная фаза // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 6. С. 49–58.
7. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей кинетики химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 4. С. 87–90.
8. Fomin P. A., Trotsyuk A. V. Approximate equation for calculation of the isentrope curve of chemically equilibrium gases // 12th Int. Symp. on Combustion Processes: Abstr., 1991.
9. Fomin P. A., Trotsyuk A. V. Model of bubble detonation // Ibid.
10. Троцюк А. В., Фомин П. А. Модель пузырьковой детонации // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28, № 4. С. 129–136.

Поступила в редакцию 22/II 1995 г.
