ТЕПЛОФИЗИКА

УДК 536.27

О.Б.Барышева

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ТЕПЛОВЫХ ЭНЕРГОУСТАНОВОК

Рассматриваемый расчет возникает в различных исследованиях в области термодинамики, тепломассообмена, газодинамики, в частности при исследовании процессов переноса в химически реагирующих газовых смесях. В представленной на рис.1 системе координат теплового пограничного слоя его толщина δ_T имеет своё физическое объяснение - представляет собой условное расстояние, на которое надо отодвинуть стенку, чтобы расход и распределение давления вдоль поверхности при течении невязкой жидкости были такими же, как при обтекании истинного контура вязкой жидкостью [1].

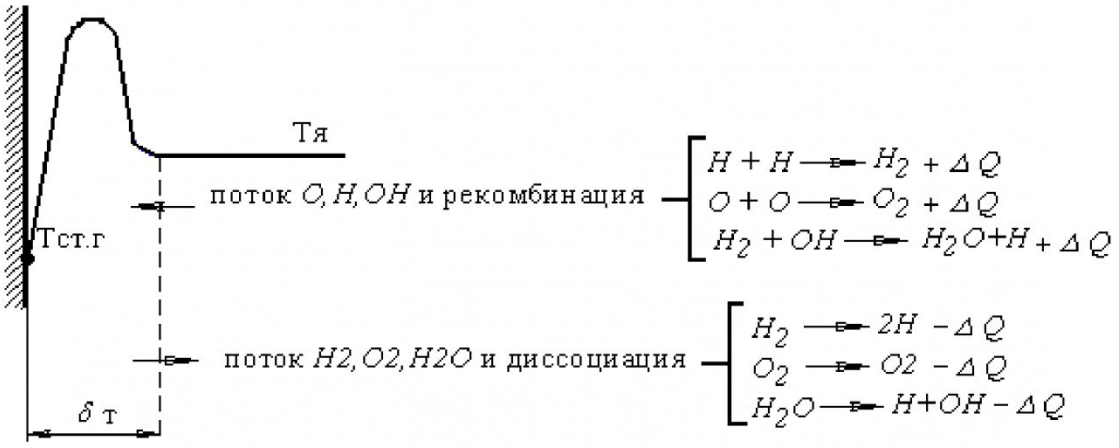

Рис.1. Система координат пограничного слоя

Для процессов, протекающих в камере сгорания высокотемпературных энергоустановок, характерны высокие температуры горения применяемых высокоэнергетичных топлив. Образующиеся продукты сгорания сильно диссоциированы. При этом температуры продуктов сгорания у стенок камеры сгорания энергоустановки (~800..1000К) значительно меньше температуры в области ядра потока (~2500…4000К). Поэтому диссоциация продуктов сгорания у стенок конструкции практически отсутствует. Для области, ограниченной температурами ядра потока и стенки камеры, характерна различная степень диссоциации продуктов сгорания. В связи с градиентами концентраций индивидуальных веществ возникают соответствующие им массовые потоки, оказывающие существенное влияние на теплофизические свойства продуктов сгорания и процессы тепло- и массообмена.

На рис.2 представлены значения диффузионных потоков для продуктов сгорания топлива кислород + керосин для давления в камере сгорания 15 МПа. Значения даны по отношению к максимальному потоку для данного топлива в диапазоне температур ~1000...3000К для условий соотношения компонентов с коэффициентами избытка окислителя АТ α =0.9 (отрицательные значения обратны направлению градиента температур).

Интересно, что при стехиометрическом соотношении компонентов рис.3 практически не существует диффузионных потоков, чего не скажешь о потоках при соотношениях компонентов при коэффициенте избытка окислителя, например, α=*0,9* рис.2.

На рис.4, 5 представлены значения коэффициентов бинарной и обобщенной диффузии того же топлива p = 15 МПа, α=0,9 для топлива кислород + керосин и кислород + водород соответственно. На этих рисунках приведено сравнение результатов расчетов коэффициентов обобщенной диффузии $\overline{D}_{H_2O-H_2}$ (линия 1), $\overline{D}_{H_2-H_2O}$ (линия 2) и бинарной диффузии $D_{H_2-H_2O}$ (линия 3) при p=15 МПа. Коэффициент бинарной диффузии не

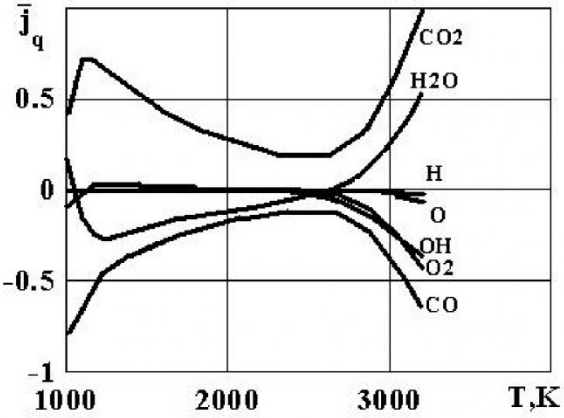

Рис.2. Зависимость диффузионных потоков веществ от изменения температуры: топливо кислород + керосин, α=0,9, p=15 МПа

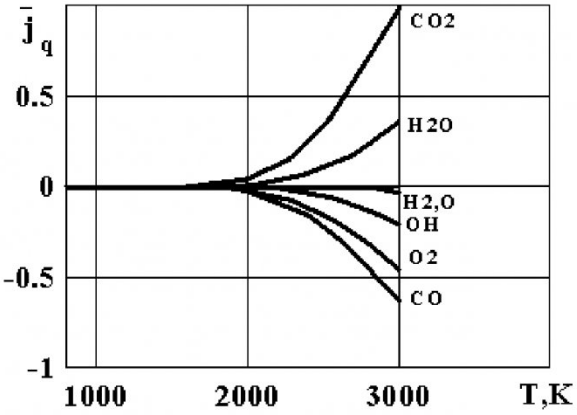

Рис.3. Зависимость диффузионных потоков веществ от изменения температуры: топливо кислород + керосин, α=1,0, p=15 МПа

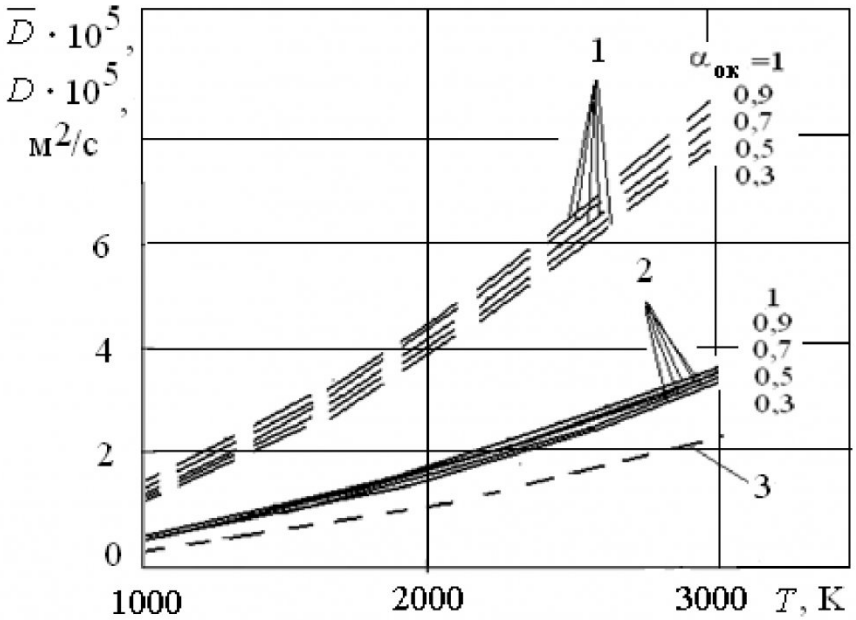

Рис.4. Зависимость коэффициентов обобщенной диффузии многокомпонентной газовой смеси от изменения температуры: топливо – кислород + керосин, p = 15МПа,. α=0,9

зависит от содержания индивидуальных веществ в смеси. Коэффициент обобщенной диффузии, начиная с температуры более 1000 К , когда проявляется, согласно термодинамическому расчету, распад высокомолекулярных углеводородов на низкомолекулярные углеводороды и углеводородные радикалы и смесь перестает быть бинарной из-за диссоциации, все в большей мере отличается от коэффициента бинарной диффузии. Это отличие зависит не только от температуры, но и коэффициента избытка окислителя α.

Очевидно, расслоение смеси по всему диапазону температур для всех углеводородных топливных композиций, чего не скажешь, о кислород - водородном топливе (рис.5). Для данного топлива применим принцип Онсагера лишь до температуры ~1700…1800К, а далее также – «расслоение» смеси.

Известно множество методик расчета состава равновесной газовой смеси и ее теплофизических и термодинамических свойств, но наиболее актуальной в наше время является методика, изложенная в справочнике [2], где базовыми уравнения вычисления параметров и свойств газовой смеси являются: уравнения диссоциации, сохранения вещества и закона Дальтона для случая $p, T = const$:

$$\ln x_j - \sum_i a_{ij} \ln x_i + \\ + \ln K_{pj} + (1 - \sum_i a_{ij}) \ln p = 0,$$

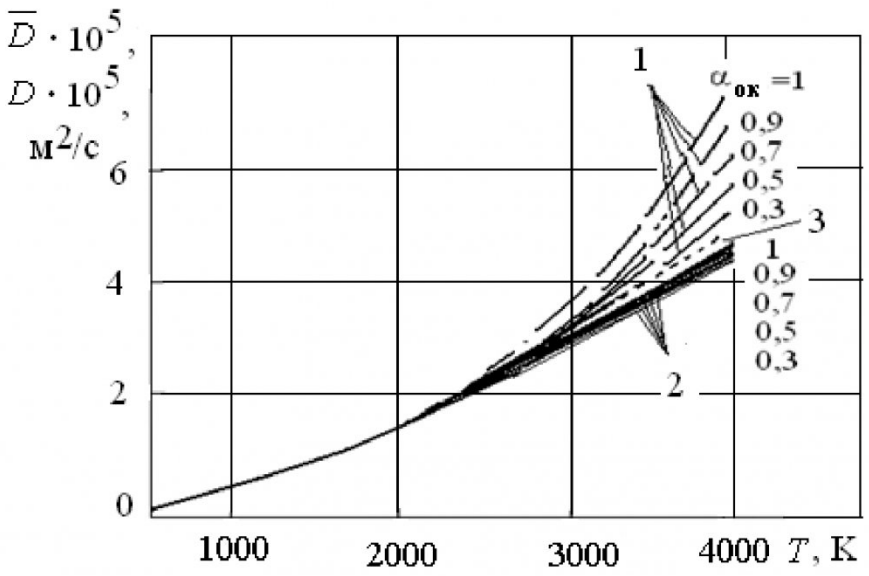

Рис.5. Зависимость коэффициентов обобщенной диффузии многокомпонентной газовой смеси от изменения температуры: топливо – кислород + водород, p = 15 МПа, α=0,9

$$\ln\left(\sum_j a_{ij}x_j + x_i\right) + \ln N - \ln b_{i\,\text{т}} = 0,$$

$$ln\sum_q x_q = 0,$$

где a_{ij} - стехиометрический коэффициент, x - мольные доли, N - суммарное число молей, $b_{i\,\text{т}}$ - число атомов в условной молекуле топлива, $ln\ K_{pj}$ - логарифм константы равновесия, p - давление.

При вычислении частных производных состава по температуре (давлению) обычно эти уравнения дифференцируют

$$\frac{1}{x_j}\left(\frac{\partial x_j}{\partial T}\right)_p - \sum_{i=1}^{m}\frac{a_{ij}}{x_i}\left(\frac{\partial x_i}{\partial T}\right)_p = -\frac{\Delta H_j}{R_0 T^2},$$

$$\sum_{j=1}^{l} a_{ij}\left(\frac{\partial x_j}{\partial T}\right)_p + \left(\frac{\partial x_i}{\partial T}\right)_p + \frac{b_{i\,\text{т}}}{N^2}\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_p = 0$$

$$\sum_{q=1}^{l+m}\left(\frac{\partial x_q}{\partial T}\right)_p = 0,$$

где R_0 – универсальная газовая постоянная, T – температура, ΔH - тепловой эффект реакции.

Полученные частные производные используются для расчета теплоемкости, скорости звука, термических коэффициентов.

В работе Льюиса [3] была выявлена зависимость составляющей коэффициента теплопроводности газовой смеси и составляющей теплоемкости, учитывающей тепловой эффект химических реакций. Здесь частные производные в формулах для расчета присутствовали в неявном виде. Для расчета составляющей коэффициента теплопроводности использовалась система уравнений

$$ln\,x_j - \sum_i a_{ij}\,ln\,x_i + $$

$$+ ln\,K_{pj} + (1 - \sum_i a_{ij})\,ln\,p = 0,$$

$$\sum_j a_{ij}\mathbf{W}_j + \mathbf{W}_i = 0, \quad i = 1,2,...m,$$

где W_q - мольный диффузионный поток.

Полученные из этой системы уравнений частные производные используются для расчета теплофизических свойств, в частности, коэффициента теплопроводности.

Однако частные производные по температуре (давлению), вычисленные разными подходами, дают противоречивые результаты, следовательно, зависимость, полученная Льюисом, имеет смысл для ограниченного диапазона температур и топливных композиций.

На рис. 6 показаны противоречия, выявленные при расчете частных производных состава по температуре, разными методами для преобладающих компонентов, например, для топлива кислород + керосин и кислород + водород.

Отклонения достигают в некоторых случаях до 70%, что несомненно сказывается на расчетах теплофизических свойств.

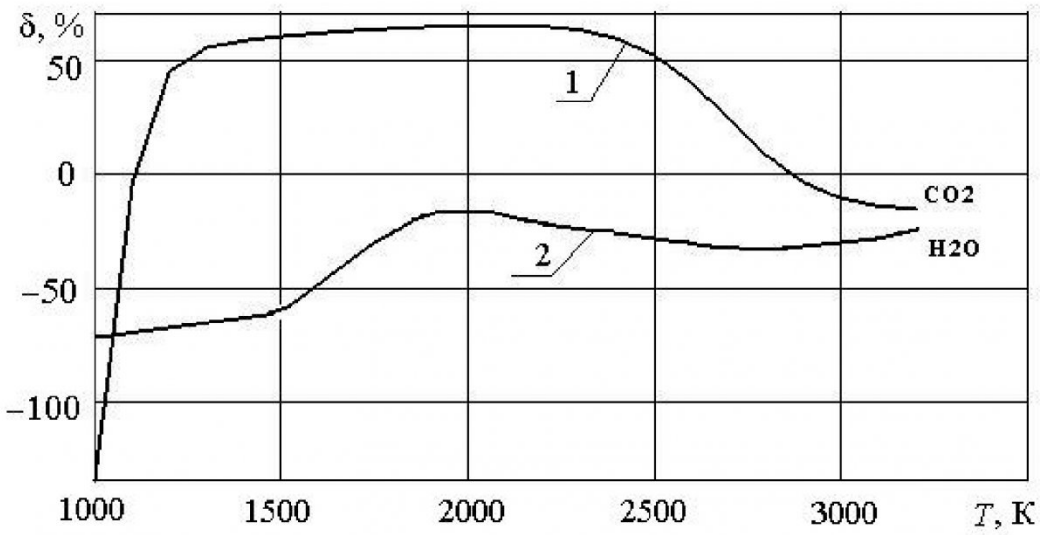

Рис. 6. Отклонения частных производных преобладающих веществ: 1 – топливо: кислород + керосин, p = 15 МПа, α=0,9; 2 – топливо: кислород + водород, p = 25 МПа, α=0,9

Предложен новый подход для вычисления составляющей коэффициента теплопроводности газовой смеси

$$\lambda_R = \frac{\widetilde{D} C_{pR} p}{R_0 T} = \frac{\widetilde{D} c_{pR} N \mu p}{R_0 T} = \widetilde{D} c_{pR} N \rho, \quad (1)$$

$$\widetilde{D} = \frac{\sum_i \sum_j \overline{D}_{ij}}{k};$$

$$k = S^3 \left(\frac{\alpha_{ок}}{6}(S-4) - \frac{7}{45} S + \frac{1}{360} S^2 + \frac{289}{360} \right)$$

где k – коэффициент, полученный обработкой многочисленных точных расчетов составляющей λ_R, S – число учитываемых в расчете компонентов смеси, C_{pR} - удельная теплоемкость, p - давление, $\overline{D}_{ij}$ - коэффициент обобщенной диффузии [4].

Проведенные расчеты указывают на возможность применения нового метода определения коэффициента теплопроводности с учетом теплоты химических превращений для различных топливных композиций. Исследование показало, что погрешность расчета коэффициента теплопроводности альтернативным методом составляет ~0,5% и не более 3% (для давлений свыше 1 МПа и температур от ~1000K до ~3000K соответственно).

Формулу (1) можно рекомендовать при расчете коэффициента теплопроводности, учитывающего теплоту химических реакций, реагирующей смеси газов, находящейся в условиях химического равновесия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П.* Теория ракетных двигателей. - М.: Машиностроение, 1989, 464 с.
2. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. / Справочник. В 10 т. // Под ред. В.П.Глушко. - М.: АН СССР-ВИНИТИ, 1971, 266с.
3. *Brokaw R.S., Svela R.A. J.* Heat Capacity and Lewis Number of a Reacting Gas. // Chem. Phys. 1966. V.44. p.4643.
4. *Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. - М.: ИЛ, 1961, 930 с.

Автор статьи:
Барышева
Ольга Борисовна
- канд.техн.наук, доцент
каф.теплогазоснабжения и вентиляции Казанского государственного архитектурно-строительного университета
e-mail: obbars@mail.ru