

氧气/煤油发动机燃气 热物理参数及输运系数计算

王 欣, 邹样辉
(北京航天长征飞行器研究所, 北京 100076)

摘 要: 为了给氧气/煤油发动机设计和热防护设计提供必要的设计参数, 针对氧气/煤油燃气进行热力学计算。运用吉布斯最小自由焓计算模型得到燃气平衡组成, 通过拟合公式的方法得到燃气的热物理参数及输运系数。通过计算, 得到氧气/煤油燃气的组分及比焓、密度、比熵、粘性系数等热物理参数和输运系数随温度和压力的变化特性。分析结果表明: 水离解对氧气/煤油燃气组分变化存在显著影响, 压力增大会导致水离解起始温度升高; 氧气/煤油燃气比焓、比熵、定压比热、粘性系数、热传导系数变化在温度较低时受压力影响较小, 当水开始离解后, 压力的影响显著增强; 组分在燃气中的扩散系数同时受到了温度和组分摩尔分数的影响; 燃气普朗特数变化受热传导系数变化的影响较大, 水离解后, 热传导系数的迅速增大使燃气的普朗特数迅速减小。

关键词: 氧气/煤油燃气; 自由焓; 平衡组分; 热物理参数计算; 输运系数计算

中图分类号: V434-34 **文献标识码:** A **文章编号:** 1672-9374 (2017) 04-0034-07

Calculation of fuel gas thermodynamic parameters and transport coefficients for oxygen/kerosene engine

WANG Xin, ZOU Yanghui
(Beijing Institute of Space Long March Vehicle, Beijing 100076, China)

Abstract: In order to provide necessary design parameters for design of the oxygen/kerosene engine and thermal protection, thermodynamic calculation of oxygen/kerosene gas is studied in this paper. The minimization Gibbs free energy calculation model was used to determine equilibrium compositions. The thermodynamic parameters and transport coefficients were derived with a fitting method of formulas. The variation characteristics of equilibrium compositions, and thermodynamic parameters and transport coefficients of oxygen/kerosene gas with pressure and temperature were obtained. The analysis results indicate that hydrolytic dissociation has an significant impact on the equilibrium compositions, and the pressure increase may cause the rising of the initial temperature of hydrolytic dissociation; the pressure began to affect thermodynamic and transport properties seriously

收稿日期: 2016-10-08; 修回日期: 2017-02-15

作者简介: 王欣 (1992—), 男, 硕士研究生, 研究领域为防隔热技术

after hydrolytic dissociation at high temperature; the diffusion coefficient of components in fuel gas are influenced by the combined effect of temperature and mole fractions. Thermal conductivity has a great effect on Prandtl number. After H_2O is dissociated, Prandtl number reduces fast as the thermal conductivity increases quickly.

Keywords: oxygen/kerosene fuel gas; Gibbs free energy; equilibrium composition; thermo-dynamic parameter calculation; transport coefficient calculation

0 引言

煤油具有密度适宜, 热值高, 燃烧性能好等特点, 在航空航天领域有着广泛的运用。作为航天发动机推进剂, 液氧/煤油可以为运载火箭提供较高的比冲; 由于其价格便宜, 加热功率高, 也被用于地面防热试验设备燃料, 进行飞行器的地面防热考核试验。近年来, 快速发展的液氧/煤油火箭发动机成为替代老一代火箭发动机的有力竞争者, 更是受到了人们的广泛关注^[1]。

燃气的热物理参数和输运系数对发动机性能有重要影响, 这些数据对发动机设计以及热防护设计有重要作用。然而目前在高温高压的环境下, 无法通过实验测量手段得到发动机燃气的热物理性质和输运性质^[2]。为得到这些参数, 国内外学者对燃气计算做了大量工作。陈安斌通过利用余函数修正法, 对烃类燃气的热力性质在理想气体的基础上进行了修正, 使得燃气热力性质计算更加精确^[3]。苏适通过最小自由焓原理对工业燃烧装置中煤、柴油混合燃料燃气组分进行了计算, 并对燃气热物性进行了拟合^[4]。阮登芳采用拟合公式的方法对内燃机汽油燃气的主要热物理性质进行了计算^[5]。David J. Pofertl、Roger A. Svehla、Bobbv H. Croom^[6-8]采用拟合公式的方法对甲烷等多种推进剂燃气进行了计算, 形成了相应燃气性质的表格可供查询。

作为一种典型推进剂, 针对氧气/煤油燃气相关的热力学计算鲜有见到。本文在最小自由焓法的基础上对氧气/煤油燃气平衡流热物理参数及输运系数的进行计算。首先利用最小自由焓法计算得到燃气组分, 再根据燃气组分采用拟合公式的方法得到燃气的热物理参数和输运系数。通过计

算, 得到燃气组分及比焓、密度、比焓、粘性系数等热物理参数和输运系数随压力、温度的变化特性, 并对计算结果进行分析。

1 计算模型

煤油燃料的燃烧机理因涉及多种碳氢化合物的反应动力学机理而十分复杂, 考虑到计算的规模和效率, 在进行燃烧产物的计算时常采用代替燃料模型。本文采用最小自由焓的方法对航空煤油发动机燃气组分进行计算, 根据文献 [9], 航空煤油选燃料模型 $C_{12}H_{24}$ 较为合理, 并且根据简化化学反应模型选取 “H, O, H_2 , OH, CO, O_2 , H_2O 和 CO_2 ” 8 种燃烧产物。

不同飞行条件或试验条件下, 燃气温度变化范围可达到 1 000 K 到 3 600 K, 压力变化范围 0.001 MPa 到 5 MPa。选定的模拟计算温度 500 K 到 4 000 K, 模拟压力 5 MPa, 1 MPa, 0.1 MPa, 0.01 MPa 和 0.001 MPa。此外, 余氧系数 α 是燃烧过程中的一个重要参数, 不同余氧系数会燃烧得到不同的产物组分, 但改变余氧系数不会对分析燃气热物性及输运性质变化规律造成影响, 本文计算取余氧系数 $\alpha=0.8$ 。

1.1 热物理参数计算模型

燃气的比焓、比热、比焓、密度等热物理参数可以通过最小二乘法拟合公式得到^[10]。对于任意单组元气体, 其冻结流定压比热 C_p^0 随温度变化的数据是根据温度范围, 对数据进行多项式拟合得到, 公式如下:

$$\frac{C_p^0}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (1)$$

拟合系数 $a_1 \sim a_7$ 可以通过查询相应温度区间的数据库得到。同理, 对于任意单组元气体的比

焓和比熵有相应的拟合计算公式。混合气体的热物理参数可以通过下列公式由单组分计算：

比焓

$$H_g = \sum_{i=1}^n H_i x_i \quad (2)$$

比熵

$$S_g = \sum_{i=1}^n (x_i S_i - x_i R_M \ln x_i) \quad (3)$$

冻结定压比热

$$c_{pf} = \sum_{i=1}^M x_i c_{pi} \quad (4)$$

式中 x_i 是组分 i 的摩尔分数。

1.2 输运系数计算模型

1.2.1 气体粘性系数及导热系数

单组分气体的粘性系数 μ 和导热系数 λ 可以通过 Svehla 拟合曲线法计算得到^[11-12]。

在已知温度的情况下，有拟合公式

$$\left. \begin{array}{l} \ln \mu \\ \ln \lambda \end{array} \right\} = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (5)$$

式中： μ 是粘性系数； λ 为气体导热系数； T 为温度； A 、 B 、 C 和 D 为拟合系数。

对于多组分混合气体，混合物粘性系数和导热系数有如下表达式

$$\delta_m = \sum_{i=1}^n \frac{x_i \delta_i}{x_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n \Phi_{ij} x_j} \quad (6)$$

式中： δ_m 是气体混合物的粘度或热传导系数； δ_i 是组分 i 的粘度或热传导系数； x_i 和 x_j 是组分 i 和 j 的摩尔分数； Φ_{ij} 是组分 i 对组分 j 的结合系数； n 是体系中气相组分的数目。

1.2.2 气体扩散系数

组分 i 对组分 j 的扩散系数 D_{ij} 可以通过下式得到

$$D_{ij} = \frac{3}{5} \frac{R_0 T A_{ij} \mu_{ij} (M_i + M_j)}{p M_i M_j} \quad (7)$$

式中： A_{ij} 为截面碰撞率； μ_{ij} 为组分间相互作用参数； $M_i M_j$ 为组分 i 和 j 的分子量； R_0 为气体常数； T 为温度； p 为压力。

混合气体扩散问题十分复杂，组分愈多求解就愈困难。采用 Blanc 的方法来计算。Blanc 表达式如下

$$D_{im} = \frac{(1-x_i)}{\left(\sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{x_j}{D_{ij}} \right)} \quad (8)$$

式中： D_{ij} 为 ij 体系双组元扩散系数； x_i 为组分 i 摩尔分数。

2 结果与讨论

2.1 燃气各组分摩尔分数的变化情况

图 1~4 分别给出了 1 MPa、0.1 MPa、0.01 MPa 和 0.001 MPa 情况下燃气各组分摩尔分数随温度变化的情况。

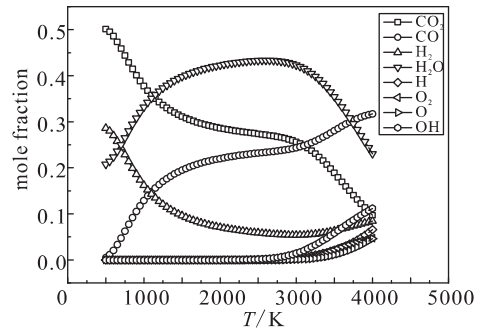


图 1 1 MPa 燃气各组分摩尔分数随温度变化的情况

Fig. 1 Variation of mole fraction of each gas component with temperature at 1 MPa

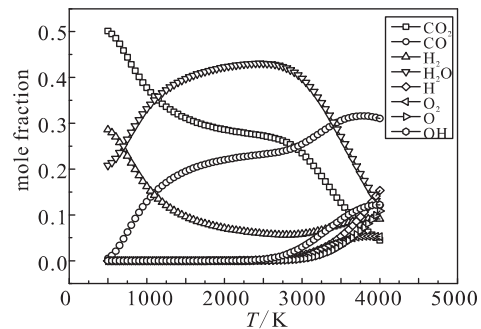


图 2 0.1 MPa 燃气各组分摩尔分数随温度变化的情况

Fig. 2 Variation of mole fraction of each gas component with temperature at 0.1 MPa

不同压力条件下，各组分摩尔分数变化趋势基本一致。以图 4 为例，500 K 时燃气主要由 CO_2 、 H_2O 和 H_2 构成。随着温度升高， CO_2 与 H_2

反应生成 CO 和 H_2O 导致 CO 和 H_2O 含量的逐步升高。当温度超过 2 200 K 后, H_2O 分子开始离解成 H, O 和 OH, 这带来了 CO_2 进一步降低, O_2 含量增大及 H_2 含量重新增大。当温度超过 2 000 K 后, O_2 开始离解, 此时 O 含量快速增加, 2 700 K 以后 H_2 开始离解, H 含量急剧增大。当温度超过 3 500 K 时 OH, O_2 和 H_2 几乎完全离解。此时, CO, H 原子和 O 原子已经成为燃气的主要成分。

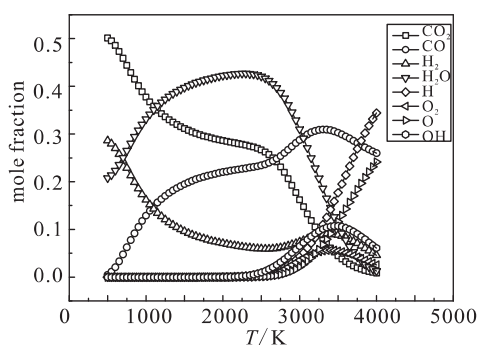


图 3 0.01 MPa 燃气各组分摩尔分数随温度变化的情况

Fig. 3 Variation of mole fraction of each gas component with temperature at 0.01 MPa

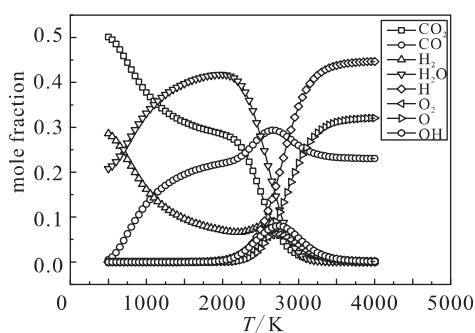


图 4 0.001 MPa 燃气各组分摩尔分数随温度变化的情况

Fig. 4 Variation of mole fraction of each gas component with temperature at 0.001 MPa

从图中燃气组分变化过程可看到, 在 H_2O 分子的离解之前, H, OH 和 O 和 O_2 含量很小且几乎没有变化。 H_2O 分子离解后, 这些组分值迅速增大并与燃气气体组分相互作用, 造成燃气组分剧烈变化。如图 1 图到 4 图所示, H_2O 分子离解受到燃气压力影响, 随压力升高, H_2O 分子的离解反应温度不断退后。在 $p=1$ MPa 条件下时, 温度

升高到 3 000 K 离解反应才开始出现。

如图 3 和图 4 所示, 尽管压力不同, 燃气组分最终都会呈现一种“稳定”的状态。在这种“稳定”状态下, CO 和 H 原子和 O 原子会成为燃气的主要成分, 并且主要成分的含量也大致相同。可见, 压力并不能影响燃气组分在高温情况下的最终组成。

2.2 燃气高温热物性变化情况

燃气高温热物性变化情况见图 5 和图 6 所示。

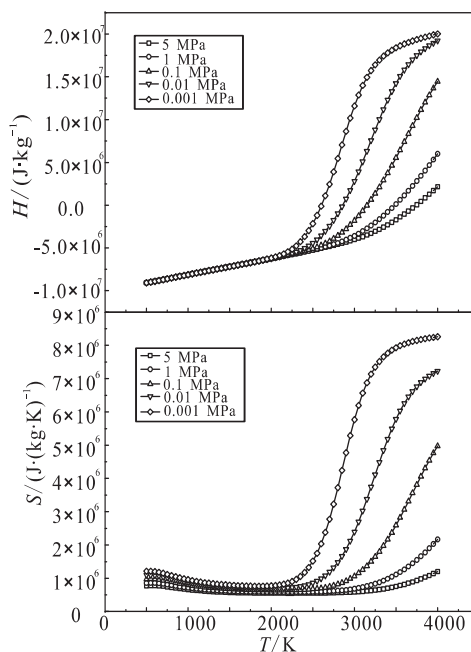


图 5 比焓、比熵随温度和压力变化图

Fig. 5 Variation of enthalpy and entropy with temperature and pressure

图 5 上图为比焓随温度和压力变化图。燃气的比焓整体随着温度的上升而增大。在 H_2O 分子离解之前, 比焓随温度近似线形增大, 受压力影响较小。到达一定温度后, H_2O 分子开始离解, 产生比焓较大的离子组分使得燃气比焓迅速增大。此时压力开始明显作用, 压力越低, H_2O 分子离解越快, 燃气比焓上升越快。随着 H_2O 分子离解完成, 此时燃气组分相对稳定, 燃气比焓随温度增大趋于平稳, 这在图中表现为比焓上升率先增大再减小。

图 5 下图为比熵随温度和压力变化图。燃气比熵在温度较低时变化较为平缓。由于发生了

CO_2 与 H_2 吸热反应, 燃气比熵随着温度的升高呈下降趋势, 压力越大反应越容易进行, 下降越明显。当温度逐渐升高, H_2O 分子开始离解生成的离子组分使燃气比熵迅速升高。此时压力作用开始加剧, 压力越低, H_2O 分子离解越快, 燃气比熵上升越快。当 H_2O 分子离解完成, 燃气组分相对稳定, 燃气比熵随温度增大趋于平稳。

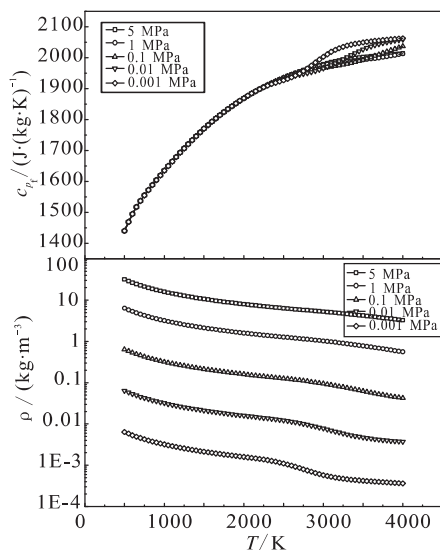


图6 冻结定压比热、密度随温度和压力变化图

Fig. 6 Variation of specific heat and density with temperature and pressure

图6上图为冻结定压比热随压力及温度的变化图。由图可见, 温度较低时, 不同压力条件下燃气的比热大致相同, 都随着温度升高而增大, 此时压力的变化几乎不产生任何影响。当 H_2O 分子开始离解之后, 比热表现为上升速率突然增大。这时, 压力变化开始显著影响上升速率, 压力越小导致离解越提前, 进而导致冻结定压比热随着温度上升越快, 上升速率越大。在 H_2O 分子离解完成之后, 燃气的组分也趋于稳定, 燃气比热随温度变化表现趋于平稳。

图6下图为燃气密度随着温度和压力的变化图。燃气密度受燃气压力影响很大。压力的增大使得燃气密度明显增大。燃气密度随温度的增大而减小, 低温时在对数坐标中呈线性关系。这些变化都比较符合气体状态方程的规律。并且从图中曲线的变化规律可以看出, 燃气组分随温度变

化不会对燃气的密度造成很大的影响。

2.3 燃气高温输运性变化情况

燃气高温输运性变化情况见图7和图8所示。图7上图为不同压力条件下, 燃气粘性系数随温度的变化图。随着温度的升高, 燃气粘性系数整体近似线形增加。在 H_2O 分子离解之前, 压力对燃气粘性系数的影响微弱。 H_2O 分子开始离解之后, 由于组分的剧烈变化, 压力开始小幅度影响粘性系数。在压力越小的情况下, 粘性系数随温度增长的越慢, 这是因为 H_2O 组分的粘性系数较大, 压力越小, H_2O 组分分离解的越快, 造成燃气粘性系数随温度增加速率降低。

如图7下图所示, 在温度较低阶段, 燃气热传导系数近似线形增加, 且压力在这个阶段几乎没有作用。随温度进一步升高, H_2O 分子开始离解, CO 等导热系数较大组分的含量升高引起燃气导热系数急剧升高。压力此时开始显著影响热传导系数随温度的上升速率, 压力越小, 热传导系数上升越快。 H_2O 分子离解结束后, 燃气组分变化开始变小, 传导系数随温度又开始成线性变化。

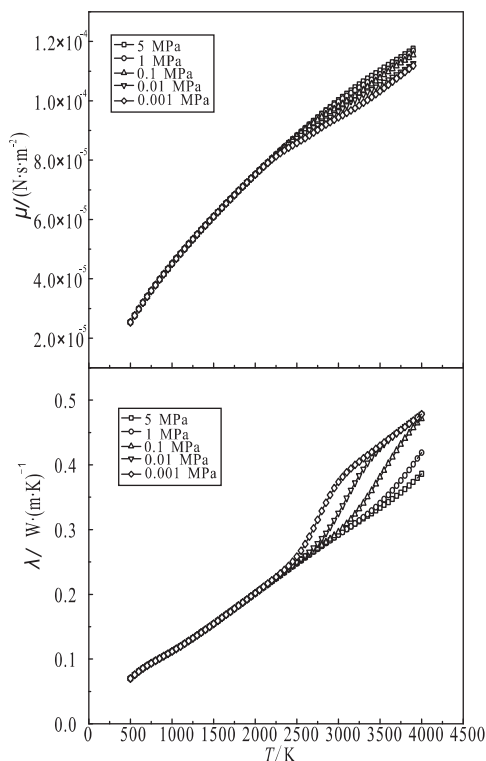


图7 粘性、导热系数随温度和压力变化图

Fig. 7 Variation of viscosity and thermal conductivity with temperature and pressure

图 8 上图为在 1 MPa 条件下为部分组分在燃气中扩散系数随温度的变化趋势图。随着温度升高, 组分在燃气中扩散系数增加越来越快。从图中可以看出 H_2O 组分在燃气中的扩散速率明显大于 CO 和 CO_2 的扩散速率。由于 CO_2 与 H_2 反应生成 CO 和 H_2O 的影响, 在 3 000 K 左右燃气中 CO 组分的含量将超过 CO_2 。组分含量是影响组分扩散系数的一个重要因素, 此时 CO 组分在燃气中的扩散系数随温度增大的速率也将大于 CO_2 组分的增大速率, 这在图中表现为 CO 在燃气中扩散系数超过 CO_2 在燃气中扩散系数。

图 8 下图为燃气普朗特数随温度和压力变化趋势图。在低温阶段压力影响较小, 随着温度升高, 普朗特数迅速增大, 并达到一个峰值。当 H_2O 开始离解后, 由于燃气热导率的增大速率超过粘性系数及定压比热的增大速率, 普朗特数随温度增大开始减小。此时, 压力影响开始增大, 压力越小, 普朗特数减小的越快。当 H_2O 离解结束, 燃气成分变化趋于稳定, 燃气普朗特数随温度变化也开始变小, 并维持在一个较低的水平。

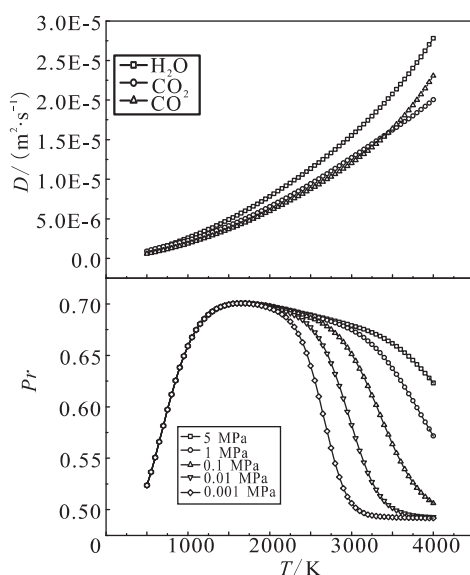


图 8 1 MPa 条件下部分气体组分扩散系数和普朗特数随温度和压力变化图

Fig. 8 Variation of diffusion coefficients and Prandtl numbers of partial gas components with temperature and pressure at 1 MPa

3 结论

对氧气/煤油发动机燃气进行热力计算, 对计算结果进行分析, 得出如下结论:

- 1) 水离解对氧气/煤油燃气组分变化存在显著影响, 压力增大会导致水离解起始温度升高。
- 2) 氧气/煤油燃气比焓、比熵、定压比热、粘性系数、热传导系数变化在温度较低时受压力影响较小, 当水开始离解后, 压力的影响显著增强。
- 3) 组分在燃气中的扩散系数同时受到了温度和组分摩尔分数的影响。
- 4) 燃气普朗特数变化受热传导系数变化的影响较大, H_2O 离解后, 热传导系数的迅速增大使燃气的普朗特数迅速减小。

参考文献:

- [1] 李斌, 张小平, 马冬英. 我国新一代载人火箭液氧煤油发动机[J]. 载人航天, 2014, 20(5): 427-431.
- [2] 童景山. 气体混合物及液体混合物的粘度和导热系数[J]. 化学工程, 1977 (6): 66-84.
- [3] 陈安斌. 湿燃气热力性质的计算方法[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2001, 33(6): 799-801.
- [4] 苏适, 蔡崧, 徐益谦. 工业燃烧装置的燃气组分及热物理参数计算[J]. 东南大学学报, 1994, 24(4): 67-72.
- [5] 阮登芳. 燃气热物理性质的计算[C]// 中国工程热物理学会工程热力学与能源利用学术会议. [S.l.]: [s.n.], 1999.
- [6] POFERL D J, SVEHLA R A. Thermodynamic and transport properties of air and its products of combustion with ASTMA-A-1 fuel and natural gas at 20, 30, and 40 atmospheres: NASA TND-7488[R]. USA: NASA, 1974.
- [7] CROOM B H, LEYHE E W. Thermodynamic, transport, and flow properties for the products of methane burned in oxygen-enriched air: NASA SP-3033 [R]. USA: NASA: 1966.
- [8] 姚通, 文斐, 钟北京. 煤油替代燃料燃烧反应骨架机理简化[J]. 工程热物理学报, 2013, 34(6): 1170-1173.
- [9] MCBRIDE B J, GORDON S, RENO M A. Thermodynamic data for fifty reference elements: NASA TP-3287 [R]. USA: NASA, 1993.
- [10] SVEHLA R A. Transport coefficients for the NASA Lewis chemical equilibrium program: NASA TM-4647

- [R]. USA: NASA, 1995.
- [11] SVEHLA R A, MCBRIDE B J. Fortran IV computer program for calculation of thermodynaminc and transport properties of complex chemical systems: NASA TND-7056[R]. USA: NASA,1973.
- [12] 童景山. 流体热物性学 - 基本理论与计算[M]. 北京: 中国石化出版社, 2008.

(编辑: 陈红霞)

(上接第 17 页)

从试验结果可以看出:

1) 每次重新装配后残余不平衡量均出现明显变化, 验证了本文配合间隙对不平衡量影响较大的判断;

2) 5 次测试的残余不平衡量最大变化程度为 $14.04 \text{ M}(\mu\text{m}\cdot\text{kg})$, 小于 $15.73 \text{ M}(\mu\text{m}\cdot\text{kg})$, 由于理论分析和实际装拆状态不完全相同, 该试验结果符合理论分析大于实际装拆情况的结论。

5 结论

本文建立了轴系上零件与转轴配合间隙对低速动平衡的影响理论模型, 并针对某涡轮泵转子进行了理论计算, 得到轴系零件单位偏心距和装配间隙对整体不平衡量的影响, 前者的大小反映了零件单独动平衡的必要性, 后者的大小反映了实际间隙对动平衡的最大影响程度。通过动平衡试验, 验证了本文所建立的理论模型, 具有一定的工程实用价值。

参考文献:

- [1] 廖明夫. 航空发动机转子动力学[M]. 西安: 西北工业大

学出版社, 2015, 19-23.

- [2] 王魁. 涡轮泵转子动平衡的控制方法研究[J]. 火箭推进, 2002, 28(6): 15-18.

WANG Kui. Study on control methool of turbopump roter dynamic balance[J]. Journal of rocket propulsion. 2002, 28 (6): 15-18.

- [3] 黄志勇, 李昌旻, 黄红. 高工况涡轮泵轴系状态对工作可靠性的影响[J]. 火箭推进, 2007, 33(1): 32-35.

HUANG Zhiyong, LI Changhuan, HUANG Hong. The effect of high operating condition turbopump shafting status on reliability[J]. Journal of rocket propulsion, 2007, 33(1): 32-35.

- [4] 窦唯, 叶志明, 闫宇龙. 涡轮泵叶轮 / 转子配合间隙对稳定性的影响[J]. 火箭推进, 2016, 42(4): 26-34.

DOU Wei, YE Zhiming, YAN Yulong. Effect of tolerance clearance between turbine rotor and impeller in liquid-propellant rocket engine on stability[J]. Journal of rocket propulsion, 2016, 42(4): 26-34.

- [5] 李斌, 张贵田. 液体火箭发动机涡轮泵转子的新型动平衡方法研究[J]. 振动与冲击, 2011, 30(6): 158-161.

- [6] GB/T9239.1-2006. 机械振动 恒态(刚性)转子平衡品质要求[S].

(编辑: 马 杰)