

ІГНАТЬЄВА Т.Є., КУЦЕНКО О.С., проф., д.т.н.

РОЗРОБКА МЕТОДУ ОБЧИСЛЕННЯ РІВНОВАЖНОГО СКЛАДУ ГАЗОВОЇ СУМІШІ

Висока температура продуктів згоряння не дозволяє досягнути граничного складу для вуглеводневих палив. Дисоціація продуктів згоряння призводить до ряду проміжних речовин, хімічна енергія яких вже відмінна від енергії граничних продуктів.

В загальному випадку схему реакцій, що протікають в газовій суміші можна представити у символічному вигляді [1]

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} B_i = 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

де a_{ij} - стехіометричний коефіцієнт i -ої речовини j -ої реакції; B_i - символи речовин, що беруть участь в реакції.

Відомо, що в рівноважному стані при заданій температурі концентрації речовин c_i в реагуючій системі повинні задовольняти системі рівнянь рівноваги

$$\prod_{i=1}^N c_i^{a_{ij}} = K_{cj} \bar{v}_j, \quad j = 1, \dots, m,$$

де K_{cj} - константа рівноваги j -ої реакції, що є відомою функцією температури T . Доповнивши системою рівнянь матеріального балансу [2]

$$\sum_{i=1}^N l_{ij} c_i = \frac{\lambda_j}{\nu}, \quad j = 1, \dots, r,$$

де l_{ij} - елементи молекулярної матриці L .

Отримаємо нелінійну систему рівнянь для визначення рівноважних концентрацій речовин реагуючої суміші при заданих температурі, питомому об'ємі і векторі концентрації елементів Λ . Рішення такої системи в загальному випадку може бути отримане тільки чисельними методами.

Найбільш вдалим методом є метод Ньютона (модифікація з регулюванням кроку). Структура рівнянь є настільки простою, що дозволяє легко побудувати універсальну обчислювальну процедуру її рішення для будь-яких систем реакцій.

Список літератури: 1. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегалін, А.П. Тишин и др.: В 5 т. – М.: Наука, 1971.– Т1. – 265 с.

2. Моделирование рабочих процес сов двигателей внутреннего сгорания на ЭВМ / Куценко А.С. – Киев : Наук. думка, 1988. – 104 с.