

# 内燃机工作过程数值计算

高孝洪 编著

国防工业出版社

## 内 容 简 介

本书系统地介绍内燃机工作过程计算的零维模型、准维模型和一维非定常模型，其内容包括各类模型的理论基础、数值方法、计算框图以及应用实例。在附录中附有两部分实用的子程序。本书为内燃机专业大学生选修课教材，也可作为研究生教材或科学技术人员的参考书。

### 内燃机工作过程数值计算

高孝洪 编著

\*

国防工业出版社出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

国防工业出版社印刷厂印装

\*

787×1092<sup>1</sup>/<sub>16</sub> 印张13<sup>1</sup>/<sub>2</sub> 314千字

1986年11月第一版 1986年11月第一次印刷 印数：0,001—1,600册

统一书号：15034·3170 定价：2.25元

## 前 言

在计算机技术业已广泛用于各行各业的今天，向大学生们系统地讲授这一技术在本学科中应用的专门知识，已成为刻不容缓的事情。《内燃机工作过程数值计算》这本教材就是为了满足这一需求而编写的。本书的内容也是对《内燃机原理》教材的补充和深化，可以作为内燃机专业大学生和研究生的选修课教材。

本书共分八章。为了使读者了解这一领域的概貌，第一章论述了各种工作过程计算的分类和用途。第三、四、五章系统地介绍了最常用的零维模型。第六章介绍计算燃烧过程、预测排放用的准维模型。第七章介绍计算内燃机进、排气压力波用的一维模型。第八章介绍适用于各类增压发动机用的闭路循环模拟计算。各类模型都需用的工质特性计算则集中在第二章中介绍。书中收集了近年来国内外广泛流行的理论模型及经验公式。在附录中附有一部分实用的子程序、拟合方程以及数据表格。因此，本书也可作为从事内燃机工作过程研究的科技人员的参考书。全书采用 SI 单位制。

本书由哈尔滨船舶工程学院张洪义主审。各章附录均由彭辉编写。陈帆、程富民参加了书稿的校对工作。

由于作者水平所限，粗疏之处在所难免，望读者予以指正。

编 者

目 录

|                                              |                                       |
|----------------------------------------------|---------------------------------------|
| 第一章 绪论..... 1                                | 第一节 工质对燃烧室内壁面的放<br>热计算 .....97        |
| 第一节 工作过程计算的用途和分类 ..... 1                     | 第二节 燃烧室的一维定常传热计算 .....107             |
| 第二节 工作过程计算的对象及主<br>要构成 ..... 4               | 第六章 准维燃烧模型 .....111                   |
| 第三节 工作过程数值计算的数<br>学模型 ..... 5                | 第一节 柴油机的准维燃烧模型 .....111               |
| 第二章 工作介质特性计算 ..... 8                         | 第二节 汽油机的准维燃烧模型 .....133               |
| 第一节 内燃机的工作介质 ..... 8                         | 第七章 进、排气系统的一维非定<br>常流动计算 .....138     |
| 第二节 工作介质的假设条件..... 8                         | 第一节 内燃机进、排气管内流动<br>计算概述 .....138      |
| 第三节 工作介质的热力特性函数 .....10                      | 第二节 特征线算法的基本原理 .....139               |
| 第四节 工质化学组分计算 .....15                         | 第三节 边界条件 .....147                     |
| 附录 燃烧产物化学平衡计算及<br>其程序PER.....23              | 第八章 增压发动机工作循环模<br>拟计算 .....165        |
| 第三章 零维模型 .....40                             | 第一节 增压发动机工作循环<br>计算概述 .....165        |
| 第一节 零维系统 .....40                             | 第二节 增压发动机的闭路循环 .....167               |
| 第二节 零维系统的约束方程 .....41                        | 第三节 闭路循环各元件的特性 .....176               |
| 第三节 零维容器的流动计算 .....44                        | 第四节 闭路循环计算实例 .....183                 |
| 第四节 零维系统的各种特例 .....51                        | 第五节 发动机性能参数计算 .....186                |
| 第五节 零维系统计算的小结 .....56                        | 第六节 工作过程循环模拟计<br>算的应用 .....188        |
| 附录 常微分方程组的龙格-库塔<br>(Runge-Kutta)解法及其程序 ...58 | 附录 径流涡轮特性计算 .....195                  |
| 第四章 放热规律计算 .....67                           | 附录 .....199                           |
| 第一节 由示功图计算放热规律 .....68                       | A.1 气体定压比热的拟合方程 .....199              |
| 第二节 放热规律的经验预测公式 .....76                      | A.2 工质常用组分的热力化学性质 .....199            |
| 附录 1 试验观察数据的样条函数拟<br>合及程序 SPLINE.....85      | A.3 常用反应的化学平衡常数 ( $\log k_p$ ) ...211 |
| 附录 2 经验公式中待定常数的回<br>归及程序LSN.....88           | A.4 常用气体的粘度和常用气体<br>的导热系数.....212     |
| 第五章 传热计算 .....97                             |                                       |

# 第一章 绪 论

自从内燃机在一八七六年问世以来,已经有一百余年的历史了。百余年来,内燃机凭借其热效率高、热负荷小、结构紧凑等优点而在车辆、船舶、工程机械等广阔的应用范围内取得了优势地位。在可以预见的将来,内燃机仍将是中、小功率范围内最主要的原动机。

然而,长期以来,内燃机主要仍然是依照经验来设计的。内燃机设计的三大计算,即热计算、动力计算和强度计算只是一种辅助性的校核计算。由于缺乏现代化的计算工具,当时的设计者不得不作出许多脱离实际的简化假设,以使计算得以可行。这些计算方法未能概括很多在实际物理过程所涉及到的复杂因素,因而对发动机的研制所起的指导作用十分有限。

正如其他领域一样,本世纪六十年代开始的数字电子计算机的普及,导致了在内燃机设计方法和理论研究上的一场变革。它在极大程度上改变了内燃机理论计算的内容、作用和地位。那些描述物理过程的微分方程组在从前是不可能求解的,而现在依靠电子计算机则可以快速地解出,这就大大提高了计算的精度。从前,结构参数、结构方案主要是通过更换部件的对比试验来确定。现在,一大部分这样的工作可以放在计算机上来进行模拟。通过模拟计算所预测的最佳方案,相当接近实际的最佳方案,这就大大节约了时间、人力和财力。

微计算机数据处理系统的普遍使用,使数值计算和实验研究更加紧密地结合起来。测试信号经过模-数转换后成为可进一步加工的信息(数据)。这些信息在经过按照某种数学模型编制的软件处理后成为更加基本的、更能反映物理过程本质的物理量,再以表格或图象的形式输出。快速深入地分析实验结果,使我们对研究的物理现象有更深刻更全面的理解。这样,数值计算和实验研究一起,成为两个平行的杠杆,有力地推动着内燃机的研究和发展。

正是在这样的背景下,无论在国内还是在国外,在内燃机工作过程数值计算方面都已经取得了很大的进展,各类数学模型日趋成熟,不少软件都已商品化,这使得我们有可能对这方面的最新成果加以总结,并试图以较为系统的形式向读者进行介绍和推荐。

## 第一节 工作过程计算的用途和分类

工作过程计算按其用途而言大体可分为设计用计算和研究用计算两类。

所谓设计用计算是以确定发动机工作参数、结构方案、尺寸为目的的计算。而研究用计算则以加深对过程的理解为其直接目的。当然,这种划分只能是大体上的,加深理解最终还是为了正确地设计。另外,也有些计算能同时起到两种作用。

### 一、设计用计算

设计用计算,以发动机的结构参数为输入变量,其输出结果则为发动机的性能指标

及工作参数。对这类计算还可以进一步划分为以下三类：

### (一) 选型论证计算

这一计算用来论证、比较发动机各种循环方案、基本参数的优劣，通常在设计的早期阶段使用。在这一阶段，发动机的结构细节尚未确定，很多结构参数、尺寸尚属未知。因此，应该尽量减少计算所需的输入参数。另外，在比较基本参数或方案（例如发动机的缸数、转速、缸径、平均有效压力、增压方式等）的优劣时，局部过程的细节并不重要，可以而且也应该采用简化的模型。例如，可以将进、排气压力视为常数，把多缸机当作单缸机来计算，以节省计算时间。

### (二) 设计和改进发动机各个局部系统用的计算

当发动机的基本参数确定以后，为设计、研究发动机的各个系统，例如燃烧系统（包括燃油系统）、进排气系统（包括二冲程扫气系统）等，常需要进行专门的计算。这些计算通常采用精确描述系统物理过程细节的模型、以期较为完整地反映系统结构各个细节对过程的影响。

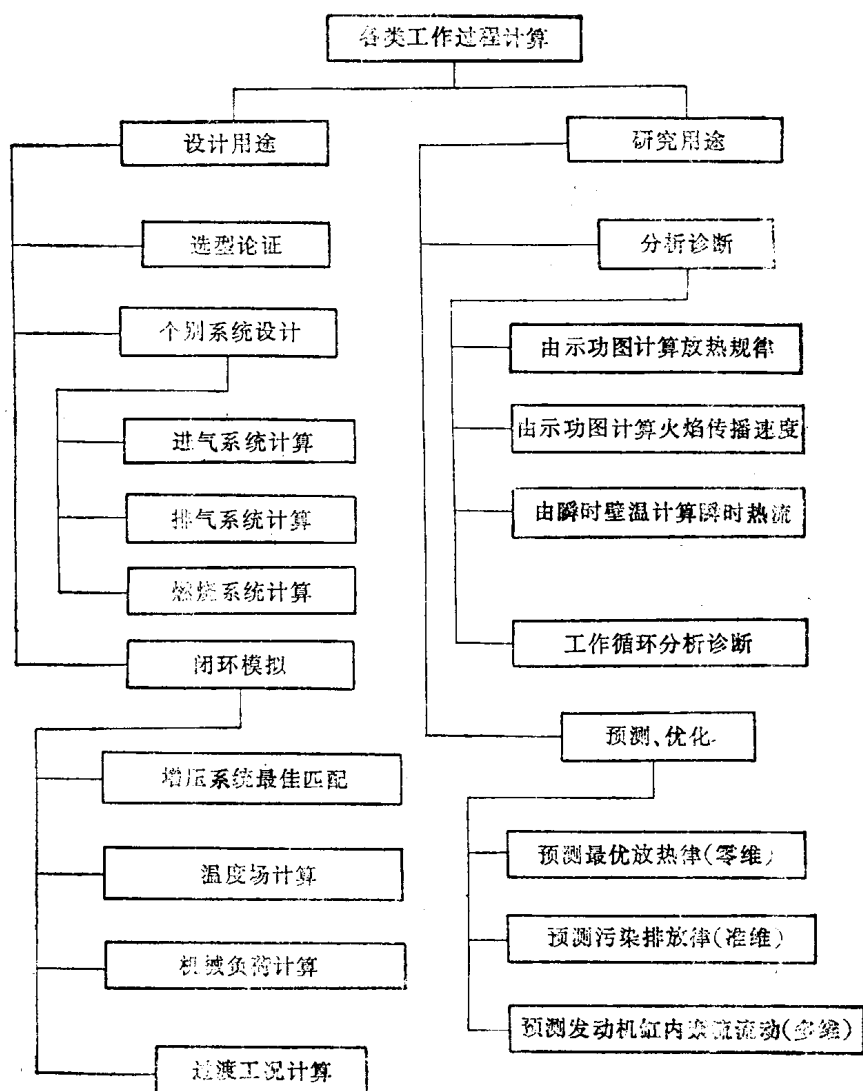


图1-1-1 发动机工作过程计算的应用

### (三) 完全的闭环工作过程模拟计算

这一模拟计算完整地计算工作循环的各个过程, 包括发动机各个系统的传热、流动等过程, 并通过迭代, 收敛的方法、实现发动机在实际运行时所遵循的一系列制约条件, 例如能量平衡(发动机气体对缸壁放热与冷却介质带走热量之间的平衡、增压器功耗与废气能量之间的平衡等)及质量守恒(进气流量与排气流量之间的守恒等)。这一计算要求较详细的输入参数, 通常是在设计的后期进行。其目的是预测发动机的各项宏观性能指标(如油耗、排温、爆压等); 确定最佳的结构参数(如喷油定时、配气定时、涡轮喷嘴面积、压气机扩压器进口角等等); 为部件结构强度提供设计依据(如为零件的机械强度计算提供发动机的气缸示功图, 为受热零件的热应力计算提供壁温及气体放热的边界条件等)。

上述三类计算的应用可以用图 1-1-1 所示的框图来表示。

## 二、研究用计算

研究用计算用来揭示系统各个因素之间的相互数量关系, 它在内燃机工作过程的研究中占有很重要的地位。对这一类计算还可作进一步的划分。

### (一) 诊断型计算

诊断就是对已有的实验结果进行分析并给予解释。诊断型计算以已知的实验结果为其输入参数, 并据此而推演、转换出过程的另一些参数。这些参数通常具有十分明显的物理意义。

内燃机工作过程所涉及的化学、物理现象是极其复杂的。过程中的许多参数不易甚至无法测得。常常有这样的情形, 人们尽管已经通过实验取得了最终的结果, 却仍然不清楚其内部的起因、机理和规律。在这种场合, 诊断型计算可能会起到重要的作用。诊断型计算可以把检测信号加工成为更加基本的或者无法测得的物理量, 使过程再现于纸上。这就可以大大加深我们对过程的理解。例如, 将柴油机燃烧过程的气缸压力信号转换成工质的放热率, 可使我们了解发动机的滞燃期、预混合燃烧、扩散燃烧等方面的情况; 将进排气管压力信号分解成为入射波及反射波, 可使我们了解波在管内传递及在边界上反射的情况。显然, 如果仅是直接观察、比较气缸和进排气系统的波形图, 那么我们得到的结论就要肤浅得多。

诊断型计算常常也就是数据处理系统专用软件的组成部分。检测信号进入微处理系统后经过这类软件的加工, 输出以新的物理量为坐标的图象, 象放热规律模型计算, 瞬时热流计算就是这类软件最常见的例子。因此, 诊断型计算也是和实验研究结合最紧密的一种计算。

### (二) 预测型计算

预测是诊断的逆过程, 它不是分析已有的结果, 而是推算将会得到的结果。诊断型计算中的输入参数常是预测型计算的输出参数。预测型计算以建立各种物理现象之间的相互关系为其目的。预测的模型可以是经验性的、半经验性的或纯理论的。

1. 经验模型 所谓经验模型是指按照某一模式对大量实验结果进行回归分析, 由此建立参数之间的相关系数, 然后将这些经验性的相关系数外推应用于未知的领域来预测可能得到的结果。

经验模型在内燃机工作过程计算中有着十分广泛的应用。例如 Вибс 放热规律就是一个著名的例子。发动机的传热过程、摩擦功率计算等等都可以归属于这一种类型。

经验模型比较简单，又是直接来源于实验结果，在适用的范围内有很好的预测效果。但是经验模型往往只反映过程在形式上、现象上的联系，并不涉及或仅仅部分地涉及所研究对象的物理本质。因此，所归结的经验公式既不具有基本的性质，也不是通用的。在使用时一定要慎重。一旦将这类模型用到不适当的范围去，预测就会失败。例如，现今发表的各种滞燃期经验公式，它们各自有不同的定义或来源于不同类型发动机的试验结果，如果不加分析地采用，就不可能得到理想的结果。

2. 半经验模型 所谓半经验模型是指模型中的一部分（子模型）是经验性的。例如 Shahed、Lyn 等人的准维多区燃烧模型，其中的喷注过程计算用气相紊流喷注理论，但其喷注长度的计算是一种经验模型。半经验模型较经验模型更为复杂，不便于纳入到整个工作循环模拟计算中去。但相对来说，它能较深入的揭示工作过程的本质，提供的结果较为丰富并且有启发性。例如，前面所说的多区燃烧模型能计算出燃烧室内各区在各曲柄转角下的瞬时温度及成分，并为发动机的  $\text{NO}_x$  排放变化规律提供了很好的说明。

3. 纯理论模型 这种模型用理论的方法来描述物理过程的细节。由于过程总是在空间进行并随时间而变化，因此，一般说来是三维非定常模型。在很多情况下，过程具有随机性质，需要作为随机过程来处理。这类模型都十分复杂，然而它研究的是一些意义重大的、用前两类简化模型所无法解决的课题，例如，燃烧室结构参数与其空气运动之间的相互关系等。因此，它也是内燃机工作过程理论研究的一个重要分支。

## 第二节 工作过程计算的对象及主要构成

一台常规的单级增压发动机的工作原理可以用图 1-2-1 来表示。

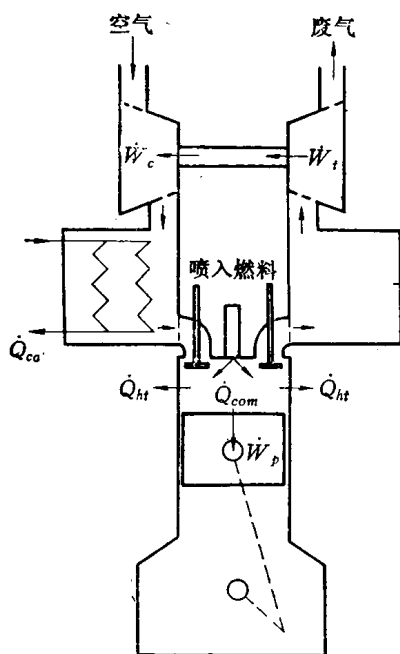


图1-2-1 增压发动机工作原理图

$\dot{W}_c$ ——压气机功率； $\dot{W}_t$ ——涡轮机功率；  
 $\dot{Q}_{ca}$ ——单位时间内空气冷却器冷却水带走的热量； $\dot{Q}_{com}$ ——单位时间内燃料燃烧释放的热量； $\dot{Q}_{ht}$ ——单位时间内工质传给燃烧室壁的热量； $\dot{W}_p$ ——活塞所得功率。

在上面这个热力学系统中，各个发生能量转换过程的部件都可称为系统的一个元件。

一个完整的工作过程模拟计算应该包括系统所有的元件，并按照相互间的制约关系，将它们有机地连结起来。这些元件是：（1）增压器的压气机，（2）中间冷却器，（3）进气管，（4）进气阀或进气口，（5）气缸，（6）排气阀或排气口，（7）排气管，（8）增压器的废气涡轮。

对于不同增压方式的发动机，系统的元件可能有所增减（这将在第八章中予以介绍）。对于在各元件内部的物理过程所作的数学描述，通常称为子模型，所相应的程序则为子程序。

上述各个元件中以缸内过程的计算最为复杂，因此，还可以作进一步的分解。例如：（1）燃烧过程，（2）传热过程，（3）工质的特性，（4）发动机的摩擦功率损失及其它机械损失。对这些过程也需要建立专门的模型。

### 第三节 工作过程数值计算的数学模型

工作过程数值计算一般可分下列几个步骤来进行：

1. 提出基本假设，建立数学模型；
2. 归结待求方程，选用数值解法；
3. 设计框图、编制程序；
4. 检验性计算及误差分析。

建立数学模型，是数值计算最初的也是最重要的阶段，它将直接关系到计算的成败。模型是对实际系统的一种概括和抽象。它通过其假设条件略去次要的现象以突出主要的过程。它引用已知的物理定律，并最终用数学的方程来描述和表达系统的特性。

基本假设在模型中占有重要的地位。它决定了模型的性质。事实上，模型往往就是按照其基本假设来命名和分类的。模型的假设条件应该力求与设计的目的、要求相一致。

一个数学模型之所以需要若干假设条件，主要是出于三个原因：

1. 由于对实际的复杂过程不够了解，而不得不提出一些猜测性的假设；
2. 由于计算机容量、速度的限制，而不得不提出将实际过程加以简化的假设；
3. 在模型精度分析的基础上，根据计算的目的、要求而对实际过程作出合理的、必要的简化假设。

通常人们用加强计算与实验研究的配合，引入经验公式等方法来尽量减少假设条件中的猜测性成分。在不得已的情况下，则以把最终实验结果与计算结果相比较的办法，来间接地验证假设条件是否合理。

至于简化性的假设条件则应力求适当。首先，一个模型不可能预测它自身没有正确表达的物理现象。因此，与计算目的相违背的过分简化的假设条件是不合理的，并将导致计算的失败。例如 $\text{NO}_x$ 主要是在火焰后高温燃烧产物区中生成的。采用将整个燃烧室视为状态相同的假设条件来预测 $\text{NO}_x$ ，就不会取得成功。

另一方面，模型不可能、也不应该包罗过程的每一个细节。在满足计算要求的前提下，模型愈是简明，计算费用就愈低，因而也就是更好的模型。一个模型总会存在一个或几个最薄弱的误差大的环节。模型的精度主要决定于这一（或这些）环节。如果不对这些环节加以改进的话，那么对模型其他部分作过分精确的计算也无助于提高模型的

精度。

内燃机工作过程的计算对象是一种热力学-化学系统。这种系统和一切多自由度系统一样，也具有两类约束条件。

一类是外部约束条件，即外界对系统所施加的约束，通常可由我们直接控制。象内燃机中的活塞运动规律、气阀开启规律、油泵凸轮的升程规律等，是外部约束条件最常见的例子。

另一类是内部约束条件，即系统本身所必须遵守的物理定律。内部约束是系统本身结构所规定的。通常不受我们直接控制。内部约束条件包括关于工质物理特性的各种定律、热力学、化学的各种定律等等。

对工作过程计算来说，比较重要的是内部约束条件的简化。因此，工作过程计算的假设条件基本上包括三类：（1）关于工质的假设；（2）关于系统内各种过程的平衡性的假设；（3）关于系统内各种过程的空间场性质的假设。现分别介绍：

1. 关于工质的假设条件是工作过程计算数学模型的重要组成部分，它规定了工质热力特性函数的基本性质。而这些热力特性函数的计算也是工作过程计算的基本内容（将在第二章第二节中予以介绍）。

2. 关于过程平衡性的假设条件，是建立在分析、比较各种过程达到平衡所需要的时间量级的基础之上的。通常外部约束条件是我们赖以改变系统的主要手段，并且反映了发动机的设计参数。因此，外部约束过程的时间标尺常被作为分析、比较的最基本的时间标尺。各类外部约束条件都是随曲轴转角而变化的函数。因此，常常以曲轴转角为最基本的时间标尺。

将各类受内部约束控制的过程与外部约束过程相比，其时间量级可能有三种情况：

（1）过程的时间量级基本上与外部约束相同。例如：根据热力学定律及状态方程，易知缸内工质按质量平均的热力学状态  $p(t)$ 、 $T(t)$  等的变化过程与外部约束  $V(t)$  具有可比的时间量级。

（2）过程的时间量级大大小于外部约束。例如，高温燃烧过程中的大部分化学反应其达到平衡的弛豫时间小于  $10^{-6}$  秒。也就是说它们的反应动力学过程是一种非常短促的、时标很小的过程。

（3）时间量级大大地大于外部约束，这是一种非常缓慢的时标很大的过程。例如， $\text{NO}_x$  在较低温度下的分解反应就属于这类过程。

上述的三种情况中，第一类过程是我们最感兴趣的过程，是我们计算的对象。对于第二类过程，模型通常是略去其建立平衡所需的弛豫时间以及动力学效应，而将问题归结为一系列的平衡状态随其平衡条件而瞬时变化的过程。这一假设被广泛用于工作过程计算。例如，对于热力学的开口系统有所谓“准定常流动”的假设。对于有化学反应的热力学系统中有所谓“迁移平衡”的假设。对于第三类过程，模型通常略去这一过程所引起的变化，在过程之初的各种物理量好象“冻结”一样不变地保存下来。

3. 关于过程空间场性质的假设条件。这一假设条件包括以下三种情况：

（1）零维假设 它把系统边界内所有各点的参量都假定为完全相同。系统的各个变量不随任何空间坐标变化，而只随时间变化。由此，制约系统的偏微分方程组蜕化为常微分方程组，而使计算得以大大简化。现有的大部分工作循环模拟计算均采用这一

假设。

(2) 准维假设 准维假设是对零维假设的一种修正。它把一部分过程视为随空间而变化的。例如,柴油机中的喷射过程,汽油机中的火焰传播过程等。然后,将整个系统按照这一过程所确定的场划分为若干个区域。每个区域内部仍然采用零维假设。这类模型的求解也仍然是常微分方程问题。

(3) 多维假设 多维假设依据情况的不同又分为以下三类:

- 1) 一维假设 适用于管道、球面问题。
- 2) 二维假设 适用于平面、轴对称问题。
- 3) 三维假设

采用上述假设,需要求解偏微分方程组,因此计算工作量大大增加。目前,一维及二维问题的解法比较成熟。

上面介绍了工作过程计算的几类基本假设条件,模型也就因此而命名。例如,依据过程平衡性假设条件的不同,可以把流动模型分为准定常流动型或非定常流动型,把燃烧模型分为化学平衡型、反应动力学型或冻结型。依据空间均匀性假设条件的不同,可以把模型称为零维模型、准维模型或多维模型。

在本书的其他各章中,将主要讨论零维、准维和一维模型。

#### 本章参考文献

- [1] R. B. Krieger, "Application of Engine Combustion Models—An Introductory Overview" —Combustion Modeling in Reciprocating Engines, Plenum Press, 1980 P485.
- [2] G. L. Borman, "Modeling Flame Propagation and Heat Release in Engines—An Introductory Overview" —Combustion Modeling in Reciprocating Engines, Plenum Press, 1980 P165.

## 第二章 工作介质特性计算

### 第一节 内燃机的工作介质

内燃机将外界的空气吸入作为其工作介质，而最终则以废气的形式排出。其间经历了一系列的变化过程，它们可以分为下列几种情况：

1. 在增压器的压气机、发动机的进气管内（对汽油机来说是化油器前的进气管内）的工作介质是空气；

2. 在四冲程柴油机的进气冲程、压缩冲程以及二冲程柴油机的压缩冲程中，气缸内的工作介质基本上是空气，同时混有不同数量的残余废气，其数量取决于扫气质量的优劣；

3. 在二冲程发动机的扫气期间，气缸内的工作介质由于混合、扩散而经历了一个变化过程，由扫气初期的含有过量空气的燃烧产物到后期变为含有若干废气的空气；

4. 在汽油机、煤气机等预混合点燃式发动机的进气、压缩冲程以及柴油机的滞燃期间，气缸内的工作介质是由空气、残余废气和燃料气体（蒸汽）所组成；

5. 在发动机的燃烧过程中，工作介质由于化学反应而发生变化，由燃料-空气混合气变为燃烧产物；

6. 在增压器的废气涡轮内，以及在膨胀、排气冲程期间，气缸内的介质是含有过量空气的燃烧产物。

由上面的分析可以知道，内燃机的工作介质具有下列特点：

1. 它是由多种化学成分构成的混合气体；
2. 在某些重要的过程中，工质的化学组分发生了变化。

工作介质的另一重要特点是，在内燃机工作过程的热力条件下，工作介质的特性非常接近于理想气体的特性。

### 第二节 工作介质的假设条件

#### 一、关于工作介质是理想气体的假设条件

关于工作介质是理想气体的假设条件普遍用于各类工作过程计算中。已知，被视为理想气体的某种纯物质的状态参数遵守下列方程

$$PV_m = RT \quad (2-2-1)$$

式中  $R$ ——单位摩尔气体常数 ( $R=8.314\text{kJ}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$ )；

$P$ ——压力， $\text{N}/\text{m}^2$ ；

$V_m$ ——该物质的摩尔体积， $\text{m}^3$ ；

$T$ ——温度， $\text{K}$ 。

由这一定义出发，按照热力学定律，可以导出理想气体的热力特性函数（例如，内

能、焓、熵、自由能等)之间的相互关系及其基本性质。在此仅指出:关于工质是理想气体的假设使工作过程计算极为方便。这是因为:

1. 某一理想气体的能量函数只是其温度的单值函数。例如,对气体的摩尔内能为

$$u = u(T) \quad \text{J/mol}$$

摩尔焓为

$$h = h(T) \quad \text{J/mol}$$

对摩尔定容比热 $c_v$ 、摩尔定压比热 $c_p$ 及比热比 $k$ 也分别为

$$c_v(T) = du(T)/dT \quad \text{J/(mol} \cdot \text{K)}$$

$$c_p(T) = dh(T)/dT \quad \text{J/(mol} \cdot \text{K)}$$

$$k(T) = c_p(T)/c_v(T)$$

对于上述能量函数与温度之间的相互关系,通常可用实验的方法来测定,并以表格的形式给出。在工作过程计算中,经常使用相应表格的拟合方程,它们也就是计算所需要的气体能量函数或其比热、比热比的关于温度的表达式。

2. 理想气体的各个热力特性函数之间存在着相当简单的解析关系。利用这些解析关系,由一种已知热力特性函数可以推求另一种热力特性函数。例如,由摩尔内能可以求得摩尔焓

$$h(T) = u(T) + RT \quad (2-2-2)$$

以及气体的摩尔熵

$$S = \int_0^T \frac{dh(T)}{T} - R \ln p/p_0 = S^0(T) - R \ln p/p_0 \quad \text{J/K} \cdot \text{mol} \quad (2-2-3)$$

式中  $S^0$ ——气体在压力等于 $p_0$ 时的摩尔熵,又称为标准熵,通常取 $p_0$ 为一个大气压。

$S^0$ 也是温度的单值函数,记作 $S^0(T)$ ,也可以以表格或拟合方程的形式来表达。

气体的摩尔自由能:

$$\begin{aligned} g &= h - TS = h - TS^0 + RT \ln p/p_0 \\ &= g^0(T) + RT \ln p/p_0 \quad \text{J/mol} \end{aligned} \quad (2-2-4)$$

式中  $g^0$ ——系气体在压力等于 $p_0$ 时的自由能,又称为标准自由能。 $g^0(T)$ 同样是温度的单值函数。

3. 因此,也可将热力特性函数对时间的微商方便地转换成独立状态量,例如,温度、压力等对时间的导数,即有

$$\dot{u} = \left( \frac{du}{dT} \right) \dot{T} = c_v(T) \cdot \dot{T} \quad (2-2-5)$$

$$\dot{h} = \left( \frac{dh}{dT} \right) \dot{T} = c_p(T) \cdot \dot{T} \quad (2-2-6)$$

$$\dot{S} = \left( \frac{dS^0}{dT} \right) \dot{T} - R \dot{p}/p \quad (2-2-7)$$

以上式中,带“ $\cdot$ ”的记号表示对时间的导数 $d/dt$ 。

## 二、关于工质是化学组分不变的混合气体的假设条件

这一假设普遍用于工作过程计算中。将整个循环的工质视为化学成分不变的同一种

混合气体的假设只用于理论循环分析。这种分析常把循环的工质视为空气。在工作过程计算中, 通常认为各个过程的工质并不相同, 但在除燃烧过程外的各个过程内, 其化学组分则不发生变化。

### 三、关于工质化学组分发生变化的假设条件

这一假设主要用于发动机的燃烧过程, 有时也用于二冲程发动机的扫气过程。取决于发动机的类型以及研究的目的、对象, 工质的组分可以用完全燃烧、化学平衡或化学反应动力学等不同的方法来进行计算。分别称为完全燃烧模型、化学平衡模型以及化学反应动力学模型。

## 第三节 工作介质的热力特性函数

### 一、化学组分不变的理想气体

一种多化学组分的混合气体也可以是理想气体。通常用下述条件来定义一种理想的混合气体:

1. 组成混合气的各种纯物质均为理想气体;
2. 混合气作为一个整体应满足状态方程, 即

$$pV_m = RT \quad (2-3-1)$$

3. 满足道尔顿定律, 即混合气的总压力等于各组分的分压力之和, 即

$$\sum p_i = p \quad (2-3-2)$$

式中  $p_i$ ——第  $i$  种组分的分压力, 它等于在同一温度下该组分单独占有混合气体体积时所具有的压力;

4. 混合气体的内能、焓、熵分别相应地等于各组分在同一温度下单独占有该容积时的内能、焓、熵的总和, 即

$$\left. \begin{aligned} \sum U_i &= U \\ \sum H_i &= H \\ \sum S_i &= S \end{aligned} \right\} \quad (2-3-3)$$

式中 足标  $i$  表示第  $i$  种成分, 无足标是混合气的热力特性函数。

依据上述条件, 若一种混合气体的各组分配比已知时, 混合气体的热力特性函数也可以求得。

设混合气体的总摩尔数为  $M$ , 第  $i$  种组分的摩尔数为  $M_i$ , 则第  $i$  种组分的摩尔分数为

$$x_i = M_i / M$$

及

$$\sum x_i = 1$$

式中  $x_i$ ——已知常数。

混合气体的平均分子量

$$w = \sum x_i w_i \quad (2-3-4)$$

单位质量混合气体的气体常数

$$R = 8.314 / w \quad \text{kJ/kg} \cdot \text{K} \quad (2-3-5)$$

现用  $u(T)$ 、 $h(T)$ 、 $s(T)$  分别代表摩尔内能、摩尔焓及摩尔熵, 则混合气体内能的总和为

$$U = u(T) \cdot M$$

第  $i$  种组分的内能为

$$U_i = u_i(T) M_i \quad (2-3-6)$$

于是

$$u(T) = \sum x_i u_i(T) \quad (2-3-7)$$

同理

$$h(T) = \sum x_i \cdot h_i(T) \quad (2-3-8)$$

$$c_v = \sum x_i c_{vi} \quad (2-3-9)$$

$$c_p = \sum x_i c_{pi} \quad (2-3-10)$$

$$s = \sum x_i s_i$$

其中

$$\begin{aligned} s_i &= s_i^0(T) - 8.314 \ln p_i \\ &= s_i^0(T) - 8.314 \ln(x_i p) \end{aligned} \quad (2-3-11)$$

$$s = \sum x_i s_i^0(T) - 8.314 (\sum x_i \ln x_i + \ln p) \quad (2-3-12)$$

对于热力特性函数的导数:

$$\dot{u}(T) = \sum x_i \dot{u}_i(T)$$

$$= \sum x_i c_{vi} \dot{T}$$

$$= c_v(T) \cdot \dot{T}$$

同理

$$\dot{h}(T) = c_p(T) \cdot \dot{T}$$

在本书的附录中列出了几种最常用的气体热力特性函数以及一部分拟合方程, 以备查用。

在某些过程中, 工质的温度变化范围不大, 这时我们可进一步用平均比热来计算能量函数及其导数。工质的平均比热定义为

$$\bar{c}_v \cdot \Delta T = \int_T^{T+\Delta T} C_v dT \quad (2-3-13)$$

$$\bar{c}_p \cdot \Delta T = \int_T^{T+\Delta T} C_p dT \quad (2-3-14)$$

$$\bar{k} = \frac{\bar{c}_p}{\bar{c}_v} \quad (2-3-15)$$

$$\Delta u = \bar{c}_v \cdot \Delta T \quad (2-3-16)$$

$$\Delta h = \bar{c}_p \cdot \Delta T \quad (2-3-17)$$

$$\dot{u} = \bar{c}_v \cdot \dot{T} \quad (2-3-18)$$

$$\dot{h} = \bar{c}_p \cdot \dot{T} \quad (2-3-19)$$

上述各式常用于进排气过程的计算中。

## 二、化学成分变化的理想气体

### 1. 总内能及总焓

当工质的化学组分不发生变化时, 它所具有的化学能也不变。由于我们只关心所涉及的能量的变化部分, 因此, 通常这类工质的内能是指内部分子运动所具有的能量。对于理想气体, 这部分能量只随温度而变化。有时把这一能量明确地称为显内能。以  $u_r$  来

表示, 则显内能为

$$u_r = \int_0^T c_v \cdot dT \quad \text{J/mol} \quad (2-3-20)$$

同理, 显焓

$$h_r = \int_0^T c_p \cdot dT \quad \text{J/mol} \quad (2-3-21)$$

当工质的化学组分发生变化时, 其所含有的化学能也发生变化, 这可用热力学的方法来测定。因此, 一个具有化学反应的热力学系统, 其相应的热力特性函数也应该把化学能包括在内, 这样能量守恒方程便能够以更加科学、更加简明的方式来表达。

把物质的化学能也包括在内的内能称为总内能, 记作  $u_o$ 。

$$u_o = \int_0^T c_v dT + E_o \quad (2-3-22)$$

相应地, 总焓为

$$h_o = \int_0^T c_p dT + E_o \quad (2-3-23)$$

式中  $E_o$ ——物质的化学能 (对于某一物质而言, 是一常数)。

对于多种化学组分的气体, 上式仍然适用, 在此

$$E_o = \sum x_i \cdot E_{oi} \quad \text{J/mol} \quad (2-3-24)$$

因此当  $x_i$  发生变化时,  $E_o$  也将发生变化。其表达式为

$$E_o = E_o(x_1, x_2, x_3 \cdots x_i \cdots)$$

## 2. 反应热

所谓反应热是指在保持反应前后温度相同 (即反应物与生成物的温度相同) 的条件下, 反应物经过完全反应变为生成物的过程中, 系统与外界所交换的总热量。如果反应是在定压下进行, 则这种反应热称为定压反应热。如果反应是在定容下进行, 则称为定容反应热。

对定容反应热的测定, 可以设想反应是在一个被冷却 (或加热) 的刚性容器内进行, 冷却 (或加热) 的热量正好等于反应放出 (或吸收) 的热量, 因而使温度保持不变 (图2-3-1)。

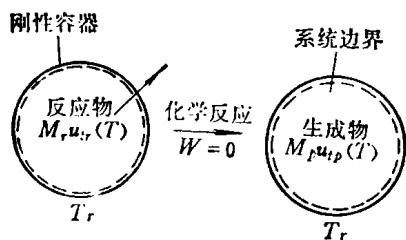


图2-3-1 定容反应热测定原理图

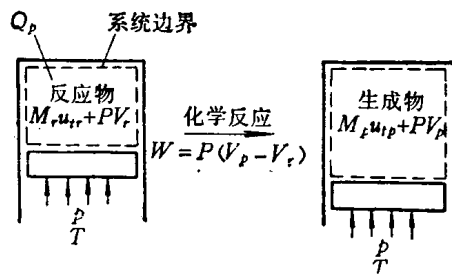


图2-3-2 定压反应热测定的原理图

以下标  $p$  表示生成物,  $r$  表示反应物,  $M_p$  及  $M_r$  分别表示生成物与反应物的总摩尔数。这里反应物及生成物的组分都不一定是单一的。

由能量守恒定律易知定容反应热:

$$Q_v = M_p u_{tp} - M_r u_{tr} = M_p \left( \int_0^{T_r} c_{vp} dT + E_{0p} \right) - M_r \left( \int_0^{T_r} c_{vr} dT + E_{0r} \right) \quad (2-3-25)$$

式中  $T_r$ ——反应温度。

$Q_v$ ，在外界向系统输入热量时（吸热反应）规定为正，反之为负。

对于定压反应热的测定，可以设想一个带有浮动活塞的气缸，活塞的背压恒定，且无摩擦（图2-3-2）。

如图，系统与外界的热交换保证了反应前后的温度不变。而浮动活塞的运动则补偿了因化学反应而引起摩尔数的变化，使系统处于常压状态。对于这一系统，其定压反应热为

$$Q_p = M_p \cdot h_{Tp} - M_r h_{Tr} = M_p \left( \int_0^{T_r} c_{pp} dT + E_{0p} \right) - M_r \left( \int_0^{T_r} c_{pr} dT + E_{0r} \right) \quad (2-3-26)$$

式中  $Q_p$  的符号规定同  $Q_v$ 。

由上可知：

（1）在反应热中，不仅包括了生成物与反应物的化学能之差，而且包含了在某一温度下反应物与生成物的显内能或显焓之差，因此，反应热一般是随温度而变化的。对于不同温度下反应热之差为

$$\Delta Q_p \Big|_{T_1}^{T_2} = M_p \int_{T_1}^{T_2} c_{pp} dT - M_r \int_{T_1}^{T_2} c_{pr} dT \quad (2-3-27)$$

式（2-3-27）称为基尔霍夫定律。

（2）定压反应热与定容反应热一般并不相等，只有当反应前后摩尔数不变时，两者才相等。这时，反应前后的容积、压力均不变。由前式也可知：

$$\int_0^{T_r} c_{pp} dT - \int_0^{T_r} c_{vr} dT = \int_0^{T_r} c_{pp} dT - \int_0^{T_r} c_{vr} dT = 8.314T,$$

$$\text{于是} \quad Q_p = Q_v = M_p \left[ (E_{0p} - E_{0r}) + \int_0^{T_r} (c_{pp} - c_{pr}) dT \right] \quad (2-3-28)$$

通常所给出的反应热，是在标准大气压下，保持系统的温度  $T_r$  等于 298 K (25°C) 时得到的。单位摩尔燃料在 298 K 下完全燃烧的定压反应热称为该燃料的热值。

### 3. 生成焓

一种化学物质的生成焓按下列条件来定义：

（1）所有纯物质在化学稳定的状态下其生成焓恒等于零。这类纯物质包括各种气体分子、金属原子等。

（2）以这些稳定物质为反应物，在正确的化学配比及反应温度  $T_r$  下进行反应，得到一摩尔的某一化合物，该时的定压反应热即称为该化合物在  $T_r$  温度下的生成焓，记为  $h_f^{T_r}$ 。

由定义可知，对各类纯物质及其混合物在化学稳定状态下，有

$$h_f^{T_r} = 0 \quad (2-3-29)$$

因而，其总内能等于显内能，即

$$\left. \begin{aligned} u_t &= u_s = \int_0^T c_v dT \\ h_t &= h_s = \int_0^T c_p dT \end{aligned} \right\} \quad (2-3-30)$$

同样