

**Н. Е. ЕРМОЛИН
В. М. ФОМИН**

**ГОРЕНИЕ ГАЗОФАЗНЫХ
И КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СИСТЕМ**

**МЕТОДЫ РАСЧЕТА
СТРУКТУРА ПЛАМЕН**



**Н. Е. ЕРМОЛИН
В. М. ФОМИН**

**ГОРЕНИЕ ГАЗОФАЗНЫХ
И КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СИСТЕМ
МЕТОДЫ РАСЧЕТА
СТРУКТУРА ПЛАМЕН**



**МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2022**

УДК 519.622.2;
519.633.6;
544.43; 662.612.2
ББК 22.192.32;
24.542.2;
24.543.122
Е 74



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту 21-11-00009, не подлежит продаже

Ермолин Н.Е., Фомин В.М. Горение газофазных и конденсированных систем. Методы расчета. Структура пламен. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2022. — 520 с. — ISBN 978-5-9221-1923-8.

В книге реализован комплексный подход к решению задач теплообмена, связанных с исследованием химической структуры пламен. Представлены методы расчета химически неравновесных течений, описываемых как полной системой уравнений Навье–Стокса, дополненной законами сохранения масс компонент, так и приближенными системами уравнений на ее основе. Рассмотрены методы выделения ведущих стадий химических процессов. Применительно к вопросу обоснования корректности масс-спектрометрического метода исследования химической структуры пламен рассчитаны газодинамические поля в пробоотборниках. Определены основные факторы, влияющие на процесс замораживания смеси в пробоотборниках. В качестве других приложений разработанных методов рассчитана сложная волновая структура, образующаяся при сверхзвуковом горении водородно-воздушной смеси в канале.

Систематизированы данные по физико-химическим процессам в пламенах энергетических материалов AP, ADN, RDX и смесевых составов на основе AP и полибутадиенового каучука. Значительное внимание уделено обзору работ по термическому разложению и горению указанных конденсированных систем. Описаны детальные кинетические механизмы, исследована структура пламен, выделены ведущие стадии процессов. Исследована структура пламен слоевых систем на основе перхлората аммония и полибутадиенового каучука. Изучена структура микропламен в окрестности крупной частицы AP, выступающей над поверхностью активного связующего. Рассмотрены вопросы, связанные с особенностями моделирования быстропотекающих химических процессов в проточных реакторах при малых числах Рейнольдса.

Книга рассчитана на научных работников, аспирантов и студентов, специализирующихся в области численных методов, химической кинетики, химии горения.

Книга подготовлена в ИТПМ СО РАН в рамках государственного задания.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	9
Условные обозначения	11
 Часть I. Численные методы расчета химически неравновесных процессов	
Введение	13
Литература	15
Глава 1. Методы выделения ведущих стадий химиче- ского процесса	18
Литература	27
Глава 2. Методы расчета неравновесных простран- ственно однородных нестационарных процессов и стационарных течений в каналах в квазиодномер- ном приближении	29
Литература	32
Глава 3. Разностная схема расчета неравновесных стационарных сверхзвуковых течений	33
3.1. Схема распада разрыва для расчета неравновесных те- чений	33
3.2. Построение больших величин \bar{W} , \bar{F}	35
3.3. Определение газодинамических функций	39
3.4. Аппроксимационные свойства схемы	40
3.5. Газодинамика неравновесного течения в каналах	44
Выводы	54
Литература	55

Глава 4. Разностная схема расчета неравновесных течений на основе полных уравнений Навье–Стокса . .	57
4.1. Вычисление диффузионных потоков	58
4.2. Преобразование системы уравнений	61
4.3. Конечно-разностная схема	63
4.4. Расчет течений реагирующего вязкого газа в каналах	69
Выводы	76
Литература	78
Глава 5. Метод расчета низкоскоростных течений реагирующего газа	79
5.1. Система уравнений для описания низкоскоростных течений реагирующего газа	79
5.2. Описание вычислительного алгоритма	82
Выводы	87
Литература	87

Часть II. Горение конденсированных систем. Структура пламен. Детальные кинетические механизмы

Глава 6. Исследование химических процессов в пламени перхлората аммония	90
6.1. Обзор результатов экспериментального и теоретического исследования термического разложения и горения перхлората аммония	90
6.1.1. Физические свойства перхлората аммония	91
6.1.2. Механизм и кинетика термического разложения перхлората аммония	91
6.1.3. Основные закономерности горения перхлората аммония	95
6.1.4. Вклад реакций в конденсированной и газовой фазе в процесс горения перхлората аммония	103
6.1.5. Кинетика газофазных процессов	108
6.2. Моделирование кинетики и механизма химических реакций в пламени перхлората аммония	112

6.2.1. Экспериментальные и расчетные данные по химической структуре пламени перхлората аммония	113
6.2.2. Механизм реакций. Константы скоростей	118
6.2.3. Результаты расчета кинетики на основе уравнений Эйлера. Выделение ведущих стадий процесса	123
6.2.4. Расчет химической структуры пламени на основе уравнений Навье–Стокса. Сопоставление с экспериментом	129
6.2.5. Влияние газофазных реакций на процесс разложения конденсированной фазы	136
6.2.6. Оценка достоверности результатов расчета и кинетического механизма	138
6.3. Модификация кинетического механизма для расчета химических процессов в пламенах хлорной кислоты с аммиаком	140
6.3.1. Механизм реакции NH_2 с O_2	140
6.3.2. Расчет кинетических параметров реакции $\text{NH}_2 + \text{O}_2 = \text{HNO} + \text{OH}$	143
6.3.3. Модификация кинетического механизма. Сравнение расчетных и экспериментальных данных по химической структуре пламен хлорной кислоты с аммиаком	150
Выводы	166
Литература	167
Глава 7. Термическое разложение и горение нитраминов	177
7.1. Механизм и кинетика термического разложения циклических нитраминов	178
7.1.1. Физические свойства циклических нитраминов	178
7.1.2. Термическое разложение нитраминов в конденсированной фазе при температурах ниже точки кипения	180
7.1.3. Высокотемпературный пиролиз нитраминов	187
7.1.4. Формальные кинетические параметры термического распада нитраминов	196
7.2. Моделирование горения циклических нитраминов	200
7.2.1. Физические параметры волны горения	202
7.2.2. Химическая структура пламени	213
7.2.3. Математическое моделирование	222
7.3. Исследование свойств кинетического механизма для описания химической структуры пламени гексогена	232
7.3.1. Кинетический механизм	234

7.3.2. Формулировка задачи и исходные данные для расчетов	250
7.3.3. Структура пламени при действии внешнего потока излучения. Роль отдельных стадий и компонентов	254
7.3.4. Самоподдерживающееся горение гексогена	267
7.3.5. Построение укороченной кинетической схемы	270
Выводы	282
Литература	284
Глава 8. Моделирование химических процессов в пламени динитраида аммония	299
Введение	299
8.1. Термическое разложение ADN	300
8.1.1. Физико-химические свойства динитраида аммония и динитраида	300
8.1.2. Свойства $N(NO_2)_2^-$	304
8.1.3. Разложение ADN в условиях низкого давления	308
8.1.4. Разложение металлических и органических солей динитраида	309
8.1.5. Механизм термического разложения ADN в жидкой фазе	311
8.1.6. Особенности термического разложения ADN в твердой фазе	314
8.1.7. Термическое разложение ADN при высокой температуре	316
Выводы	337
8.2. Горение составов на основе ADN	339
8.2.1. Горение ADN при воздействии лазерного излучения	339
8.2.2. Особенности процесса горения составов на основе ADN	341
8.3. Анализ экспериментальных данных по составу продуктов термического разложения ADN	345
8.4. Анализ экспериментальных данных по химической структуре пламени ADN	353
8.4.1. Структура пламени при $p = 3$ атм	356
8.4.2. Структура пламени при $p = 6$ атм	356
8.5. Кинетический механизм для описания химической структуры пламени ADN	360
8.5.1. Физико-химические свойства газообразного динитраида	361

8.5.2. Физико-химические свойства нитрамида NH_2NO_2 . . .	363
8.5.3. Детальный кинетический механизм для описания химической структуры пламени ADN	364
8.5.4. Тестировка кинетического механизма: расчет и сопоставление с экспериментом процесса пиролиза и окисления NH_3 в смесях NH_3/Ar и $\text{NH}_3/\text{N}_2\text{O}/\text{Ar}$ за отраженными ударными волнами	380
8.6. Моделирование процесса пиролиза продуктов сублимации динитрамида аммония в условиях низких давлений	384
8.6.1. Особенности моделирования реакции NH_3 с $\text{HN}(\text{NO}_2)_2$ в условиях быстрого протекания процессов и низких давлений	385
8.6.2. Сопоставление расчетных данных с экспериментом. Роль отдельных стадий и компонентов в химическом процессе	390
8.7. Структура пламени ADN	395
8.7.1. Химические процессы в первой зоне тепловыделения в пламени ADN. Реакция NH_3 с $\text{HN}(\text{NO}_2)_2$ в условиях умеренных давлений	395
8.7.2. Оценка вклада аэрозолей в химические процессы в первой зоне тепловыделения пламени ADN	400
8.7.3. Сопоставление граничных условий с термодинамическими свойствами и химическим составом ADN. Химические процессы в смесях HDN/ N_2 и $\text{NH}_3/\text{HDN}/\text{N}_2$. . .	408
8.7.4. Химические процессы во второй зоне тепловыделения пламени ADN	411
8.7.5. Третья зона тепловыделения в пламени ADN. Разложение N_2O и NO , формирование равновесных составов O_2 , H_2O , N_2	427
8.8. Редукция кинетического механизма	432
Выводы	437
Литература	440
Глава 9. Химические процессы в пламенах конденсированных систем на основе перхлората аммония и полибутадиенового каучука	451
Введение	451
9.1. Структура пламен, кинетика и механизм химических реакций в пламенах гомогенизированных смесевых составов	453

9.1.1. Экспериментальные данные по тепловой и химической структуре пламен СТТ на основе АР и СТРВ	453
9.1.2. Кинетический механизм	460
9.1.3. Результаты расчетов	462
9.2. Кинетические параметры формальных реакций	475
9.2.1. Метод расчета	476
9.2.2. Термокинетические параметры формальных стадий в пламенах СТТ на основе АР и СТРВ	479
9.3. Формальный кинетический механизм для описания структуры пламен гетерогенных конденсированных систем	483
9.4. Моделирование химических процессов в пламенах гетерогенных конденсированных систем	485
9.4.1. Горение слоевой системы	486
9.4.2. Горение активного связующего, содержащего крупные зерна окислителя	495
Выводы	502
Литература	504
Заключение	509
Приложение	511