

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	7
1. Элементы химической термодинамики	15
1.1. Основные определения	15
1.2. Три начала термодинамики	16
1.3. Термодинамические функции	18
1.3.1. Внутренняя энергия	19
1.3.2. Энтальпия	21
1.3.3. Энергия Гельмгольца.....	23
1.3.4. Энергия Гиббса	24
1.4. Адиабата Пуассона.....	25
1.5. Стандартная теплота образования и теплота реакции	27
1.6. Состав многокомпонентной смеси	33
1.7. Химический потенциал и условие химического равновесия	35
1.8. Константа равновесия	39
1.9. Расчёт равновесного состава смеси при заданной температуре	43
1.10. Расчёт равновесного состава и температуры смеси в адиабатических условиях	44
1.11. Адиабатическая температура горения	49
2. Элементы химической кинетики.....	55
2.1. Механизмы реакций	55
2.2. Скорость химической реакции.....	59
2.2.1. Прямая элементарная реакция.....	59
2.2.2. Обратимая элементарная реакция.....	60
2.2.3. Многостадийные обратимые реакции	61
2.2.4. Глобальный химический механизм	62
2.3. Константа скорости химической реакции	63
3. Горение в гомогенном реакторе	67
3.1. Модель гомогенного реактора	67
3.2. Замкнутый реактор постоянного давления.....	71
3.3. Замкнутый реактор постоянного объёма	73
3.4. Проточный реактор идеального перемешивания.....	75

3.5. Зависимость скорости реакции от температуры	78
4. Элементы газовой динамики	82
4.1. Модель реагирующей многокомпонентной сплошной среды.....	82
4.1.1. Уравнения переноса.....	82
4.1.2. Замыкающие соотношения	84
4.1.3. Числа подобия	90
4.2. Разрывные течения. Ударная адиабата	91
4.3. Режимы распространения волны горения: детонация и дефлаграция	98
5. Самовоспламенение и зажигание	112
5.1. Тепловая теория воспламенения.....	114
5.1.1. Адиабатический тепловой взрыв	115
5.1.2. Тепловой взрыв в условиях внешнего теплообмена.....	120
Теория Семёнова.....	120
Роль энергии активации	128
Период индукции при наличии теплотерь	130
Влияние выгорания реагентов	131
Тепловой взрыв из неравновесных начальных условий.....	133
Теория Франк-Каменецкого.....	143
5.2. Самовоспламенение газовых смесей.....	149
5.3. Зажигание реакционноспособных смесей	154
5.3.1. Зажигание горячей поверхностью.....	155
5.3.2. Зажигание тепловым потоком	160
5.4. Реактор идеального перемешивания	163
6. Ламинарное пламя в смеси предварительно перемешанных реагентов	167
6.1. Нормальная скорость ламинарного пламени	167
6.2. Элементы теории ламинарного пламени	177
6.2.1. Внутренняя структура ламинарного пламени	177
6.2.2. Тепловая теория ламинарного пламени	178
6.2.3. Теплокинетическая теория ламинарного пламени.....	180
6.2.4. Толщина прогретого слоя и зоны реакции.....	187
6.3. Численное моделирование ламинарного пламени.....	190
6.4. Неустойчивость ламинарного пламени. Влияние теплотерь	196

7. Турбулентное горение перемешанных газов	200
7.1. Цели и задачи теории турбулентного горения	200
7.2. Режимы турбулентного горения перемешанных реагентов	202
7.3. Скорость турбулентного пламени	207
7.3.1. Теория и эксперименты Дамкёлера	209
7.3.2. Теория Щёлкина.....	211
7.3.3. Динамика роста площади поверхности пламени.....	212
7.3.4. Другие теории для скорости турбулентного пламени	214
7.4. Скорость выгорания реагентов в турбулентном пламени	217
7.4.1. Замыкание с помощью скорости турбулентного пламени	218
7.4.2. Модель дробления вихрей	220
7.4.3. Модель Брея-Мосса-Либби (BML)	223
Средняя скорость реакции	224
Корреляция глубины превращения и плотности	228
Корреляция глубины превращения и скорости газа	229
7.4.4. Другие модели турбулентного горения перемешанных реагентов.....	231
Модели на основе удельной площади поверхности пламени	231
Динамическое уравнение для функции плотности вероятности	232
Замыкание условных моментов.....	233
8. Диффузионное горение газа	235
8.1. Особенности диффузионного пламени	235
8.2. Характеристики и классификация диффузионных пламён	240
8.3. Струйное диффузионное пламя в неподвижной атмосфере.....	246
8.4. Естественно-конвективное пламя в неподвижной атмосфере	255
8.4.1. Высота пламени	255
8.4.2. Структура и динамика пламени	259
9. Ламинарное диффузионное пламя.....	265
9.1. Пассивный скаляр (переменные Шваба–Зельдовича).....	265
9.2. Состав смеси продуктов сгорания как функция смесевой доли	270
9.2.1. Конечная скорость реакции	270
9.2.2. Бесконечно быстрая необратимая реакция (модель Бурке– Шумана)	271
9.2.3. Химическое равновесие	272

9.2.4. Смешение компонентов в отсутствие химической реакции ..	274
9.3. Энтальпия, температура и плотность смеси как функции смесевой доли	275
9.4. Температура диффузионного пламени	278
9.5. Структура диффузионного пламени в пространстве пассивного скаляра	281
9.6. Учёт сложных механизмов реакций.....	288
9.7. Влияние деформации поля скорости на погасание пламени.....	291
10. Турбулентное диффузионное пламя	296
10.1. Классификация режимов турбулентного диффузионного горения	296
10.2. Роль пассивного скаляра.....	300
10.3. Статистический подход к описанию турбулентного диффузионного горения	301
10.4. Численное моделирование турбулентного диффузионного пламени	308
10.4.1. Модель на основе функции плотности вероятности для пассивного скаляра	313
10.4.2. Модель дробления вихрей и её модификации	318
10.4.3. Другие модели турбулентного диффузионного горения.....	321
Модели на основе удельной площади поверхности пламени	322
Замыкание условных моментов.....	322
Лагранжевы методы.....	324
10.5. Примеры численных расчётов	327
Заключение	332
Библиографический список	334
Список обозначений	346