УДК 533.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ МЕТАЛЛОГАЗОВЫХ ГОРЮЧИХ СМЕСЕЙ В ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ПОТОКЕ ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

© 2019 г. В. Ю. Гидаспов¹, Н. С. Северина^{1, *}

¹Московский авиационный институт, Москва, Россия *E-mail: severina@mail.ru Поступила в редакцию 28.01.2019 г.

После доработки 28.02.2019 г. Принята к публикации 27.03.2019 г.

Приводится физико-математическая модель, позволяющая описывать процессы самовоспламенения, горения и детонации горючих металлогазовых смесей. Разработана упрощенная физико-математическая модель процесса. Дисперсные частицы считаются многокомпонентными, учитываются процессы плавления, испарения материала частиц, а также поверхностные реакции, в которых могут участвовать как жидкие, так и газообразные компоненты. Несущий газ считается многокомпонентным с возможностью протекания произвольного числа химических реакций. Рассматривается случай, когда продукты сгорания находятся в состоянии термодинамического равновесия, при этом в них учитывается наличие мелкодисперсных частиц металлов, оксидов и нитридов металлов. Расчетным путем определены структура и минимальная скорость распространения стационарной детонационной волны. Показано, что вычисленные в волнах параметры асимптотически стремятся к своим равновесным значениям. Разработанные физико-математическая модель и вычислительные алгоритмы могут быть использованы при создании методик моделирования горения и детонации металлогазовых смесей в многомерной постановке.

DOI: 10.1134/S0040364419040069

введение

В настоящее время большой теоретический и практический интерес вызывают задачи образования и распространения волн горения и детонации в многофазных средах, состоящих из частиц горючего и газообразного окислителя. Особый интерес среди них представляют проблемы, связанные с горением и детонацией воздушных смесей с углеводородами и частицами металлов, в частности алюминия, магния и бора. Горение металлизированных топлив и углеводородов имеет как много общих закономерностей, так и ряд принципиальных отличий. Горение капель углеводородного топлива происходит в газовой фазе: горят продукты испарения, при этом температура самих капель существенно ниже температуры продуктов сгорания. Горение газовзвесей металлических частиц сопровождается протеканием поверхностных и газофазных химических реакций, а также образованием конденсированных продуктов на поверхности частицы и в продуктах сгорания, в то время как температура частиц может превышать температуру окружающих газов. Оригинальные результаты и обзоры экспериментальных и расчетно-теоретических исследований горения металлогазовых и углеводородных топлив содержатся в большом количестве статей и монографий [1-32].

Из обзора литературы, в частности, следует, что экспериментально изучалась в основном детонация смесей мелкодисперсного алюминия в воздухе, детонация магниево-воздушных смесей исследовалась в небольшом числе работ, анализ детонации боро-воздушных смесей практически отсутствует. В случае смесей магния и бора имеется значительное число экспериментальных и расчетно-теоретических исследований горения частиц в воздухе и кислороде. Необходимо отметить, что детонационная (равновесная ударная) адиабата для горючих смесей является объективной характеристикой процесса горения. Детонационная адиабата содержит точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции, а также точки, соответствующие адиабатическому сгоранию топлива при заданных удельном объеме и давлении, что позволяет рассчитывать величину тепловыделения в соответствующих идеальных реакторах.

В предлагаемой работе исследуется процесс самовоспламенения, горения и детонации взвесей алюминия, магния и бора в воздухе [2, 5, 8, 22—24]. Считается, что материал частиц испаряется и одновременно участвует в реакциях изменения состава капли (образовании оксидов алюминия, магния, бора). В газовой фазе происходят химические превращения, приводящие к образованию различных соединений, состоящих из элементов, входящих в состав горючего и воздуха, количество и фазовый состав которых существенно зависит от соотношения горючего и окислителя. Процесс сгорания заканчивается установлением скоростного, температурного, фазового и химического равновесий.

Разработанные математические модели, вычислительные алгоритмы и компьютерные программы апробированы на задачах расчета высокоскоростного горения в газокапельных углеводородных и металлогазовых топливных смесях [13, 18, 23, 25, 27–32, 37].

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Исследуется процесс самовоспламенения, горения и детонации мелкодисперсной взвеси алюминия, магния и бора в воздухе в канале постоянного сечения. Рассматривается течение за ударной волной, распространяющейся с постоянной скоростью [13, 18, 23, 25]. При построении физико-математической модели процесса считается, что течение одномерное, объемная доля частиц в газе мала, эффекты вязкости теплопроводности и диффузии существенны только при взаимодействии частиц с газом, химические реакции протекают в газовой фазе и на поверхности частиц. Дробление и коагуляция частиц не рассматриваются. Стационарные двухфазные течения, возникающие в канале постоянного сечения за стационарной ударной волной (УВ), распространяющейся по горючей смеси со скоростью D, при сделанных выше предположениях описываются аналогичной, используемой в [13, 18, 23, 25] системой дифференциально-алгебраических уравнений

$$\rho v + n_s m_s v_s = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0},$$

$$\rho v^2 + p + n_s m_s v_s^2 = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2,$$

$$\rho v \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) + n_s m_s v_s \left(e_s + \frac{v_s^2}{2} \right) =$$
(1)

$$= \rho_0 v_0 \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right),$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0}.$$

$$\frac{d\rho v\gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} = W_i, \quad i = 1, ..., N,$$

$$v_s \frac{dm_{si}}{d\xi} = \dot{m}_{si} = W_i \mu_i / n_s, \quad i = N_s + 1, ..., N + N_s, \quad (2)$$

$$v_s \frac{du_s}{d\xi} = \dot{u}_s, \quad v_s \frac{dm_s H_s}{d\xi} = \dot{H}_s.$$

Здесь р, *p*, *e*, γ_i , μ_i — плотность, давление, внутренняя энергия, мольно-массовые концентрации и молекулярные веса компонент соответственно; n_s , m_s , e_s , H_s , γ_{is} , m_{si} — число частиц в единице объе-

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 57 № 4 2019

ма, масса, внутренняя энергия, энтальпия, число молей *i*-го вещества в килограмме массы частицы, масса *i*-го вещества в частице соответственно; \dot{u}_s , \dot{H}_s , \dot{m}_{si} — выражения, описывающие скорости изменения скорости, энтальпии и массы *i*-го вещества частицы; W_i — число молей *i*-го вещества, образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых переходов. В системе уравнений (1), (2) в список из N веществ в газовой фазе могут входить конденсированные компоненты. Вещества, входящие в состав дисперсной частицы, нумеруются индексами $N + 1, ..., N + N_S$, соответствующие им газофазные и твердые продукты могут также присутствовать в газовой фазе.

При рассмотрении течения за УВ $\xi = Dt - x$ (расстояние от ударной волны до рассматриваемой точки *x*, *t* – время), v = D - u, $v_s = D - u_s$ – скорость газа и частиц относительно УВ, индексом 0 обозначены параметры перед УВ.

Из системы (1), (2) может быть получено дифференциальное уравнение для скорости потока:

$$\rho a^{2} \left(\frac{\rho h_{T}}{p_{T}} - 1 \right) (M^{2} - 1) dv =$$

$$= \rho v \sum_{i=1}^{N} \left(h_{\gamma_{i}} - \frac{h_{T}}{p_{T}} p_{\gamma_{i}} \right) d\gamma_{i} + n_{s} v_{s} \left[h_{s} + \frac{v_{s}^{2}}{2} - h - \frac{v^{2}}{2} + a^{2} \left(\frac{\rho h_{T}}{p_{T}} - 1 \right) + \frac{\rho v h_{T}}{p_{T}} (v - v_{s}) \right] dm_{s} - n_{s} v_{s} m_{s} \left[v \left(\frac{\rho h_{T}}{p_{T}} - 1 \right) + (v - v_{s}) \right] du_{s} + n_{s} v_{s} m_{s} dh_{s}.$$
3десь $a^{2} = p_{\rho} \frac{\rho h_{T}}{\frac{\rho h_{T}}{\rho - 1}} - \frac{\rho h_{\rho}}{p_{\rho}}, \quad M = \frac{v}{a}, \quad a - c \kappa opocthermore$

звука, нижние индексы Т, р, ү_i значают частное дифференцирование по соответствующему параметру. Из термодинамики следует, что $\rho h_T / p_T - 1 > 0$ [33]. Дифференциалы $d\gamma_i, du_s, dh_s,$ *dm*_s определяются описанными ниже моделями химической кинетики, межфазных сопротивления и тепломассообмена соответственно. Данное дифференциальное уравнение для относительной скорости содержит особенность в случае, когда в процессе решения $M^2 - 1 = 0$, а правая часть уравнения не равна нулю, и тогда рассматриваемая система решения не имеет [33-35]. Точка Чепмена-Жуге соответствует одновременному выполнению равенства $M^2 - 1 = 0$ и достижения состояния равновесия, т.е. равенству нулю правой части данного дифференциального уравнения.

Для замыкания системы (1), (2) используются модели термодинамики, химической кинетики, сопротивления и тепломассообмена, аналогичные приведенным в [13, 18, 23, 25, 28, 36]. В рассматриваемом случае газовая смесь представляет собой смесь совершенных газов, термодинамические свойства которой описываются заданием потенциала Гиббса [37] вида

$$G(p,T,\gamma) = \sum_{i=1}^{N} \gamma_i \left[RT \ln \left(p\gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^{N} \gamma_j \right) + G_i^0(T) \right].$$

Потенциал Гиббса веществ, входящих в состав частиц, считается зависящим от температуры и в ряде случаев от давления:

$$G_{iS}(p,T) = \gamma_{iS} \left(G_{iS}^0(T) + \frac{1}{\rho_{Si}(T)} (p - P_0) \right),$$

$$i = N + 1, \dots, N + N_S.$$

Здесь $G_i^0(T)$ — известные функции, стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонент [37], ρ_{Si} — плотность компонента, входящего в состав частицы. Все остальные термодинамические параметры могут быть рассчитаны с использованием выражения для потенциала Гиббса и его частных производных по давлению, температуре и концентрациям [37].

Произвольный механизм химических реакций и фазовых переходов при участии в том числе и жидких компонентов может быть записан в следующем виде [5, 33, 35]:

$$\sum_{i=1}^{N+N_s} \vec{v}_i^{(r)} M_i \xrightarrow{\psi^{(r)}} \sum_{i=1}^{N+N_s} \vec{v}_i^{(r)} M_i, \quad r = 1, \dots, N_r + N_{rs},$$

где $v_i^{(r)}$ – стехиометрические коэффициенты, M_i – символ молекулы *i*-го вещества. Число молей *i*-го вещества, образующегося в единицу времени в единице объема смеси, записывается традиционным образом:

$$W_{i} = \sum_{r=1}^{N_{r}+N_{rs}} (\bar{\mathbf{v}}_{i}^{(r)} - \bar{\mathbf{v}}_{i}^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}).$$

Здесь W^r – скорость *r*-й реакции. В случае реакций на поверхности частиц и фазовых переходов ($r = N_r + 1, ..., N_r + N_{rs}$) выполняется соотношение

$$\dot{m}_{i}^{r} n_{S} \frac{1}{\mu_{i}} = \left(\bar{v}_{i}^{(r)} - \bar{v}_{i}^{(r)}\right) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}), \quad \dot{m}_{i} = \sum_{r=N_{r}}^{N_{r}+N_{rS}} \dot{m}_{i}^{r}$$

Выражения для \dot{m}_i^r определяются соответствующими моделями тепломассообмена и кинетики поверхностных реакций. В высокотемпературном случае (T > 2000 K) химические превращения, протекающие в газовой фазе, можно рассматривать в равновесном приближении [5].

В этом случае концентрации химических компонент могут быть найдены из решения нелинейной системы уравнений

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, ..., \gamma_N) = 0, \quad i = 1, ..., N$$

или из решения эквивалентной ей системы уравнений химического равновесия [5, 13, 35]

$$\frac{P_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N} A_K^i \exp\left(\sum_{l=1}^{N_e} A_l^i Z_l - G_i^0(T) / RT\right) = \gamma_K^0, \quad (3)$$

$$k = 1, \dots, N_e,$$

$$\gamma_{i} = \frac{P_{0}V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_{e}} A_{K}^{i} Z_{K} - G_{i}^{0}(T) / RT\right), \quad V = \frac{1}{\rho}.$$
 (4)

Здесь $\gamma_{K}^{0} = \sum_{i=1}^{N} A_{K}^{i} \gamma_{i}, k = 1,..., N_{e}$ — заданное число молей *K*-го элемента в газовой фазе. Система нелинейных алгебраических уравнений (3) устанавливает связь между двумя термодинамическими параметрами *V* и *T* и параметрами *Z_K*, *K* = 1,..., N_e в состоянии химического равновесия. Если *V* и *T* известны, то значения *Z_K* могут быть найдены из (3), а затем из (4) могут быть рассчитаны равновесные концентрации $\gamma_{i}, i = 1,..., N$, а также их частные производные по термодинамическим параметрам [5, 33, 35]. Таким образом, в состоянии термодинамического равновесия γ_{i} являются неявно заданными функциями удельного объема, температуры и элементного состава

$$\gamma_i = \gamma_i(V, T, \gamma_1^0, ..., \gamma_{Ne}^0), \quad i = 1, ..., N.$$

Необходимо отметить, что система уравнений (3) может быть использована для расчета равновесного состава при наличии жидких и твердых компонент. Жидкая и твердая фазы при этом трактуются как совершенный газ, состоящий из кластеров данного вещества, включающих *К* молекул [5, 13]. Выражения для молекулярного веса и молярного потенциала Гиббса такого "газа" имеют вид

$$\mu_s^* = K\mu_s,$$

$$G_s^*(p,T,\gamma) = RT \ln\left(p\gamma_s^* / p_0 \sum_{(j)} \gamma_j\right) + KG_s^0(T),$$

где μ_s — молекулярный вес, $G_s^0(T)$ — стандартный молярный потенциал Гиббса жидкой фазы [37].

Если записать условие химического равновесия для кластера, то при больших K оно автоматически переходит в условие равновесия между газовой и жидкой фазами. В реальных расчетах уже при K = 500 ошибка при определении массовой доли жидкой фазы не превышает 1%.

Модели сопротивления и тепломассообмена испаряющейся частицы характеризуют зависимости $\dot{u}_S, \dot{m}_S, \dot{H}_S$ от текущих значений параметров

капель и обтекающего их газа. Применены полуэмпирические критериальные зависимости для квазистационарных, континуальных режимов тепломассообмена и сопротивления одиночных испаряющихся капель, обтекаемых многокомпонентным газом [5, 36, 38].

Неравновесными считаются процессы тепломассообмена между газом и частицами

$$\sum_{r=N_r+1}^{N_r+N_{rs}} (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}) = \sum_{r=1}^{N_{rs}} \dot{m}_i^r \neq 0.$$

Используется гипотеза о том, что процесс испарения происходит в "тонком слое" вокруг частицы, в котором плотность постоянна [5, 36] и равна плотности газа р. Будем считать, что мольномассовые концентрации газовых компонент, участвующих в процессе межфазного массообмена у поверхности частиц, вычисляются из условия равенства потенциалов Гиббса компонент, участвующих в реакциях испарения (конденсации) и поверхностных реакциях окисления, вычисленных при температуре частицы T_s и плотности газа, а остальные γ_i^S — из условий химического равновесия в газовой фазе. Средние концентра-

равновесия в газовой фазе. Средние концентрации и температура в "тонком" слое рассчитываются по формулам

$$\overline{\gamma}_i = \beta \gamma_i^s + (1 - \beta) \gamma_i, \quad \overline{T} = \beta T_s + (1 - \beta) T,$$

где β — некоторый параметр из интервала [0, 1] (в расчетах β = 0.5).

Выражение для потока *i*-го компонента в реакции испарения (конденсации) в соответствии с диффузионной моделью [5, 18, 36] может быть записано в виде

$$\dot{m}_{i}^{r} = -2\pi d \frac{m_{Si}\rho_{S}}{\rho_{Si}m_{S}} \overline{D}_{i}\overline{\rho}\delta_{mi}^{0} \ln\left(\frac{1-\alpha_{i}\rho_{i}/\rho}{1-\alpha_{i}\rho_{i}^{H}/\rho}\right) =$$

$$= -2\pi d \frac{m_{Si}\rho_{S}}{\rho_{Si}m_{S}} \overline{D}_{i}\overline{\rho}\delta_{mi}^{0} \ln\left(\frac{1-\alpha_{i}\overline{\gamma}_{i}\mu_{i}}{1-\alpha_{i}\gamma_{i}^{S}\mu_{i}}\right).$$
(5)

Здесь $\rho_i^H = p_i^H / \rho R T_S$, $p_i^H = p_i^H (T_s)$ – давление насыщенных паров *i*-го вещества при температуре частицы, α_i – параметр, вообще говоря, зависящий от кинетики межфазного массообмена (в расчетах $\alpha_i = 1$).

Для описания межфазного массообмена и поверхностных реакций рассматриваются три реакции:

$$M^{C} \Leftrightarrow M,$$
 (6)

$$\mathbf{M}_{X}\mathbf{O}_{Y}^{c} \Leftrightarrow \mathbf{M}_{X}\mathbf{O}_{Y} \tag{7}$$

и реакции окисления металла

$$XM^{C} + \frac{Y}{2}O_{2} \Leftrightarrow M_{X}O_{Y}^{c},$$
 (8)

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 57

где М – символ молекулы металла, индекс "с" относится к твердой и жидкой фазам, *X*, *Y* – число атомов металла и кислорода в молекуле окисла. Концентрации металла, оксида металла и кисло-

рода у поверхности частиц (γ_i^S) находятся из условий равновесия реакций (6), (7) и (8) соответственно. Скорости испарения (конденсации) металла и оксида металла определяются по формуле (5), а скорости притока (оттока) кислорода к частице по формуле (5) — диффузионная модель или по кинетической модели:

$$\dot{m}_{O_{2}}^{R3} = \pi d_{S}^{2} \frac{m_{J} \rho_{S}}{\rho_{J} m_{S}} \delta_{mO_{2}}^{0} K T_{S}^{m} \left(\frac{d_{S}}{d_{S}^{0}} \right)^{n} \rho \times \\ \times \exp(-E/T_{S}) \left(\gamma_{O_{2}} - \gamma_{O_{2}}^{S} \right), \qquad (9) \\ J = \begin{cases} M, & \gamma_{O_{2}} > \gamma_{O_{2}}^{S}, \\ M_{X} O_{Y}, & \gamma_{O_{2}} < \gamma_{O_{2}}^{S}. \end{cases}$$

Здесь K, n, m, E — константы, подбираемые из условия согласия скорости массообмена с экспериментальными данными.

Выражение для потока тепла *Q* от газа к частице может быть записано [5, 18, 36] как

$$Q = \frac{\overline{C}_P \delta_T^0 (T - T_S) \sum_i \dot{m}_{si} / \delta_{mi}^0}{e^{\frac{\overline{C}_P \sum_i \dot{m}_{si}}{2\pi d_S \overline{\lambda}}} - 1}.$$

Здесь $\delta_{mi}^0 = 1 + 0.287 \operatorname{Re} \operatorname{Sc}_i (\operatorname{Re} \operatorname{Sc}_i^{4/3} + 1.232)^{-1/2}$

и $\delta_T^0 = 1 + 0.287 \operatorname{RePr}(\operatorname{RePr}^{4/3} + 1.232)^{-1/2} -$ поправки на ненулевую скорость обтекания капель по-

током газа, Re =
$$\frac{|v - v_s| d_s}{\overline{\eta}}$$
, Pr = $\frac{\eta c_p p}{\overline{\lambda}}$, Sc_i = $\frac{\eta}{\overline{D}_i}$, \overline{D}_i ,

 $\overline{\lambda}$ — коэффициенты диффузии и теплопроводности, \overline{C}_p — теплоемкость, $\overline{\rho}$ — плотность вычислялись по средним значениям в "тонком слое" вокруг частицы. Эффективные коэффициенты диффузии паров вещества капель в многокомпонентном газе и вязкости рассчитывались по приближенной формуле Уилки, а коэффициент теплопроводности по формуле Массона и Саксена с использованием уточненной корреляции Эйкена [37].

При наличии химических реакций уравнение для нахождения температуры частицы имеет вид [13, 18, 23]

$$\frac{dm_s H_s}{dt} = Q + \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rS}} \sum_{i=1}^{N} \left(\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)} \right) \times \\ \times (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) \frac{\mu_i}{n_s} H_i(T_s).$$
(10)

В процессе теплообмена материалы, входящие в состав частицы, могут переходить из твердого

№ 4 2019

агрегатного состояния в жидкое и обратно. В работе считается, что процессы плавления и кристаллизации протекают равновесно. В этом случае суммарная энтальпия частиц может быть записана как

$$H_{s}(T) = \sum_{i=1}^{N_{s}} \left(\gamma_{i}^{s} H_{i}^{s}(T) + \gamma_{i}^{l} H_{i}^{l}(T) \right).$$
(11)

Здесь верхние индексы *s* и *l* относятся к твердой и жидкой фазам, содержание *i*-го компонента в частице равно сумме соответствующих концентраций

$$\gamma_i = \gamma_i^s + \gamma_i^l = \frac{m_{Si}}{m_S \mu_i}.$$

Значение энтальпии H_s может быть найдено из (10), а температура частицы T_s и концентрации γ_i^s , γ_i^l из (11). При фиксированных концентрациях γ_i энтальпия частицы (11) является монотонновозрастающей функцией температуры и для вычисления температуры и концентраций γ_i^s , γ_i^l может использоваться приведенный ниже алгоритм. Вещества, входящие в состав частицы, нумеруются в порядке возрастания температуры плавления

 T_m^i . В нижеприведенных формулах, если индекс начала суммирования больше индекса конца суммирования, суммирование не производится.

Если
$$H_s < \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^1),$$

то $T_s : H_s = \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_s), \quad \gamma_i^s = \gamma_i, \quad \gamma_i^l = 0.$
Если $\sum_{i=1}^{j-1} \gamma_i H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^j) <$
 $< H_s < \sum_{i=1}^{j} \gamma_i H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^j), \quad j = 1, \dots, N_s,$
то $T_s = T_m^j;$
 $\gamma_j^s = \frac{H_s - \sum_{i=1}^{j-1} \gamma_i H_i^l(T_m^j) - \sum_{i=j}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^j)}{H_i^s(T_m^j) - H_i^l(T_m^j)},$
 $\gamma_j^l = \gamma_j - \gamma_j^s, \quad \gamma_i^l = \gamma_i, \quad \gamma_i^s = 0, \quad i = 1, \dots, j - 1;$
 $\gamma_i^l = 0, \quad \gamma_i^s = \gamma_i, \quad i = j + 1, \dots, N_s.$
Если $\sum_{i=1}^{j} \gamma_i H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^j) < H_s <$
 $< \sum_{i=1}^{j} \gamma_i H_i^l(T_m^{j+1}) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_m^{j+1}), \quad j = 1, \dots, N_s - 1$

то
$$T_s: H_s = \sum_{i=1}^{j} \gamma_i H_i^l(T_s) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_i H_i^s(T_s),$$

 $\gamma_i^l = \gamma_i, \quad \gamma_i^s = 0, \quad i = 1, ..., j; \quad \gamma_i^l = 0, \quad \gamma_i^s = \gamma_i,$
 $i = j + 1, ..., N_s.$
Если $H_s > \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_i H_i^l(T_m^{N_s}),$
то $T_s: H_s = \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_i H_i^l(T_s), \quad \gamma_i^s = 0, \quad \gamma_i^l = \gamma_i.$

Для интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2) используется модифицированный метод У.Г. Пирумова [25, 29—32, 35], на каждой итерации которого с высокой точностью решается система нелинейных алгебраических уравнений (1), (3). Метод интегрирования обеспечивает точное выполнение законов сохранения элементного состава.

Рассматриваемая система дифференциальноалгебраических уравнений в случае, когда частицы полностью испаряются, имеет предельное равновесное решение: точку, лежащую на равновесной адиабате, удовлетворяющей системе нелинейных алгебраических уравнений:

$$\rho v = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0} = Q_0,$$

$$\rho v^2 + p = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2 = I_0,$$

$$e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} =$$

$$= \frac{\rho_0 v_0 \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2}\right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2}\right)}{\rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}} = \frac{E_0}{Q_0},$$

$$p = \rho R \sum_{i=1}^{N} \gamma_i T, \quad e = \sum_{i=1}^{N} \gamma_i e_i^0(T),$$

$$\gamma_i = \gamma_i (V, T, \gamma_1^0, \dots, \gamma_{Ne}^0), \quad i = 1, \dots, N.$$

Из данной системы уравнений могут быть получены предельные значения v_0 , при которых данная система имеет решение и которые являются для двухфазной смеси аналогами скорости детонации Чепмена—Жуге [13, 18, 23, 25, 32].

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование детонации частиц алюминия в воздухе. Исследуется процесс самовоспламенения и детонации взвеси алюминия в воздухе [1–13] за ударной волной, распространяющейся с постоянной скоростью. За УВ происходит прогрев частиц до температуры воспламенения за счет теплообмена с газовой фазой, а также гетерогенной экзотермической химической реакции образования окисной пленки Al_2O_3 . После воспламенения





Рис. 1. Зависимость параметров ДВ Чепмена—Жуге от отношения расходов частиц алюминия и воздуха; (а): *1* – скорость ДВ Чепмена—Жуге, *2* – давление/1000, *3* – температура (простые маркеры – двухфазный расчет, закрашенные – эксперимент [33]); (б), (в): массовые концентрации компонент, (б) – равновесный расчет, (в) – двухфазный.

алюминий одновременно участвует в реакциях изменения состава капли (образования оксида алюминия) и испарения, при этом температура частиц может существенно превышать температуру окружающей среды. В газовой фазе происходят химические превращения, приводящие к образованию соединений алюминия с кислородом и азотом, количество и фазовый состав которых существенно зависит от соотношения алюминия и кислорода в горючей смеси. Процесс сгорания заканчивается установлением скоростного, температурного, фазового и химического равновесий. В процессе окисления капля становится многокомпонентной и состоит из алюминия и оксида алюминия (Al₂O₃). В интересных для практики случаях в процессе нагрева частиц могут достигаться температуры плавления и кипения алюминия ($T_m^{\text{Al}} = 933.61$, $T_b^{\text{Al}} = 2792$ K) и окси-да алюминия ($T_m^{\text{Al}_2\text{O}_3} = 2327$, $T_b^{\text{Al}_2\text{O}_3} = 3253$ K).

Для описания межфазного тепломассообмена и изменения состава частиц используется сокращенный по сравнению с [4] кинетический механизм поверхностных реакций, включающий реакции испарения (конденсации) и окисления алюминия (6)–(8) с X = 2, Y = 3. Стехиометрическое соотношение: $(m_{Al}/m_{Air})_{CT} = 0.262$. Скорости реакций (6)–(8) в первом приближении можно найти из соотношений (5).

Рассматривалась горючая смесь, состоящая из воздуха (0.21O₂ + 0.79N₂) и твердых частиц алюминия, продукты сгорания включали 14 компонент [6]: AlO₂, Al₂O₃, Al₂O, Al₂O₂, N₂, O₂, NO, AlN, $Al_2O_3(x)$, Al(x), AlN(x), O, N, Al, термодинамические свойства которых заимствовались из [37]. На рис. 1 приведены результаты численного моделирования параметров детонационной волны (ДВ) Чепмена-Жуге для смеси, состоящей из частиц алюминия и воздуха при нормальных условиях ($p_0 = 101325 \text{ Па}, T_0 = 298.15 \text{ K}$). Полученные результаты хорошо согласуются с данными экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, которые приводятся в [7]. Графики параметров (рис. 1а) имеют максимум при отношении начальных массовых расходов алюминия и воздуха $m_{\rm Al}/m_{\rm Air}$, близком к стехиометрическому. В рассмотренном диапазоне значений $m_{
m Al}/m_{
m Air}$ в равновесном составе в газовой фазе (рис. 1б) могут присутствовать мелкодисперсные алюминий, нитрат алюминия и окись алюминия. Точка минимума на графике температуры (рис. 1а, кривая 3) при $m_{\rm Al}/m_{\rm Air} \sim 0.65$ связана с появлением в продуктах сгорания жидкого нитрата алюминия.

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена—Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Рассчитанные минимальная скорость детонации (рис. 1а, маркеры *I*) и температура (рис. 1а, маркеры *3*) отличаются от равновесных (рис. 1, сплошные кривые *I*, *3*) менее чем на 0.5%. Давление (рис. 1а, маркеры *2*) в области $m_{\rm Al}/m_{\rm Air} > 0.5$ отличается более существенно, что связано с неполным испарением частиц.

На рис. 2 приведены рассчитанные зависимости параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении алюминий/воздух, близком к стехиометрическому, от лабораторного времени (время, отсчитываемое от момента прохождения ударной волны через точку пространства. где расположен наблюдатель). Расчет проводился до достижения состояния термодинамического равновесия. Скоростное и температурное равновесия (кривые 1-4), наступало примерно через 10 мкс. Расход частиц в процессе расчета увеличивался, а газа уменьшался (кривые 5, 6). Алюминий, содержащийся (рис. 2, кривая 7) в частице, через 30 мкс полностью израсходовался, при этом количество окисла (кривая 8) в частице росло за счет конденсации из газовой фазы вплоть до выхода на равновесие. В равновесном составе в газовой фазе при $m_{\rm Al}/m_{\rm Air} = 0.2$ в однофазном расчете (рис. 1б) присутствует жидкий оксид алюминия, а в двухфазном (рис. 1в) – нет, так как он входит в состав частицы.

Моделирование детонации частиц магния [1–8, 14–18] в воздухе. Температура воздуха, приводящая к воспламенению газовзвеси частиц магния в воздухе, может быть ниже температуры плавления магния [1], поэтому в работе предполагается, что в химических реакциях с кислородом участвует как "жидкий", так и "твердый" магний. В процессе окисления частица становится многокомпонентной и состоит из магния (Mg) и оксида магния (MgO). В процессе теплого взаимодействия с воздухом частица нагревается и ее температура может достигать температур плавления и испарения магния ($T_m^{Mg} = 923$, $T_b^{Mg} = 1363$ K) и оксида магния ($T_m^{MgO} = 3100$, $T_b^{MgO} = 3600$ K).

Для описания поверхностных реакций используется кинетический механизм, включающий реакции испарения (конденсации) и окисления магния по механизму (6)-(8) с X = 1, Y = 2. Стехиометрическое соотношение $(m_{\rm Mg}/m_{\rm Air})_{CT}$ = = 0.354. Скорости реакций (6), (7) в первом приближении можно найти из соотношений (5). Для нахождения скорости реакции (8) можно использовать диффузионную (5) и кинетическую (9) модели [14, 15]. Считается, что скорость притока кислорода к частице магния прямо пропорциональна объемной концентрации кислорода и площади поверхности капли, занятой магнием. Значение приведенной энергии активации E = = 12535 К заимствовано из [15]. Значение константы K = 59 подбиралось из условия совпаде-



Рис. 2. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени (D = 2000 м/c, $m_{\text{Al}}/m_{\text{Air}} = 0.2$): *1*, *3*, *5* – *U*, *T*, ρU продуктов сгорания; *2*, *4*, *6* – *U*, *T*, ρU частиц; *7* – $m_{\text{Al}} \times 10^8$ в частице, *8* – $m_{\text{Al},O_3} \times 10^8$ в частице.

ния рассчитанной предельной температуры воспламенения одиночных сферических частиц магния ($d_s^0 = 15-50$ мкм) с экспериментальными данными, приведенными в [15]. Отличие не превысило 0.5%. В формуле (9) использовались следующие параметры: $d_s^0 = 1$ мкм, n = 2, m = 0.

Кинетическая модель (9) позволяет достаточно точно определить параметры воспламенения частиц магния, однако дает сильно завышенное значение температуры горения [15]. Диффузионная модель (5), наоборот, не позволяет корректно определять предельную температуру воспламенения, но дает достоверную температуру сгорания частиц при высоких температурах газа [1].

В настоящей работе в качестве скорости притока кислорода к частице выбирается минимальная из рассчитанных по кинетической и диффузионной моделям — кинетически-диффузионная модель [14]. Для тестирования модели в [18] расчетным путем воспроизведены три режима нагрева частиц магния: без воспламенения частиц, воспламенение с погасанием, воспламенение [14].

Изучалась горючая смесь, состоящая из воздуха $(0.21O_2 + 0.79N_2)$ и частиц магния, продукты сгорания включали десять компонент: MgO, O₂, N₂, NO, MgO(ж), Mg(ж), Mg₃N₂(ж), O, N, Mg, термодинамические свойства которых заимствовались из [37]. На рис. 3 приведены результаты расчетов параметров равновесной детонации Чепмена—Жуге для рассматриваемой смеси при нормальных условиях. Пиковые значения скорости детонации и температуры при сгорании ча-



Рис. 3. Зависимость параметров ДВ Чепмена–Жуге от отношения расходов частиц магния и воздуха: (а)– (в) – см. рис. 1; * – жидкое состояние.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 57 № 4 2019



Рис. 4. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени (D = 2000 м/c, $m_{\text{Mg}}/m_{\text{Air}} = 0.2$): I-6-см. рис. 2; $7-m_{\text{Mg}} \times 10^8 \text{ кг в ча$ $стице}$, $8-m_{\text{MgO}} \times 10^8 \text{ кг в частице}$.

стиц магния ниже, чем у алюминия (рис. 1а, 3а), при этом при большом массовом содержании металла скорость детонации выше в смеси магния с воздухом. В равновесных продуктах сгорания магния (рис. 36) присутствуют в виде мелких частиц оксид магния, а при $m_{\rm Mg}/m_{\rm Air} > 1.35$ нитрид магния, в неравновесных расчетах (рис. 3в) при $m_{\rm Mg}/m_{\rm Air} > 1.1$ мелкодисперсный оксид магния отсутствует.

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена—Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Рассматривались частицы магния с начальным диаметром 1 мкм.

На рис. 4 приведены графики изменения параметров продуктов сгорания в пересжатой ДВ при соотношении магний/воздух, близком к стехиометрическому. Скоростное и температурное равновесия (кривые 1-4) наступали примерно через 6 мкс. На графике температуры содержатся полочки, соответствующие температурам плавления магния и оксида магния. Магний, содержащийся (рис. 4, кривая 7) в частице, через 10 мкс полностью израсходовался, при этом количество оксида магния (рис. 2, кривая 8) в частице выросло, а затем уменьшилось из-за испарения. В газовой фазе при $m_{Mg}/m_{Air} < 1.1$ в двухфазном расчете (рис. 3в) присутствует мелкодисперсный оксид магния.

Моделирование детонации частиц бора [1, 8, 9, 19–24] в воздухе. Особенностью горения бора по сравнению с магнием и алюминием является то, что температуры плавления и кипения оксида бора ($T_m^{B_2O_3} = 723$ K, $T_b^{B_2O_3} = 1953$ K), образующегося в процессе окисления бора кислородом, существенно ниже температур плавления и кипения бора ($T_m^{\rm B} = 2348, T_b^{\rm B} = 3931$ K). Характерные тем-пературы горения бора составляют 2700–3200 К (при детонации 3000-3700 К), при этом пиковые значения достигаются в узкой зоне в окрестности стехиометрии (($m_{\rm B}/m_{\rm air})_{CT}=0.105$). Таким образом, при избытке окислителя частица может либо полностью испариться, либо состоять из жидкого оксида бора, а при недостатке окислителя на момент окончания горения частица будет состоять из трудно испаряющегося бора [8, 19–24]. Разработанная модель тестировалась в [23] моделированием горения бора в кислороде при различных давлениях. Полученные результаты хорошо согласуются с данными [8] по значениям температуры и массовой концентрации конденсированного бора в продуктах сгорания.

При математическом моделировании считается, что продукты сгорания бора в воздухе включают 14 компонент: ВО₂, В₂О₃, В₂О, В₂О₂, N₂, О₂, NO, BN, B₂O₃(ж), B(ж), BN(ж), O, N, B. Для описания поверхностных реакций используется кинетический механизм, включающий реакции испарения (конденсации) и окисления бора по механизму (6)–(8) с *X* = 2 и *Y* = 3. Скорости реакций (6) и (7) в первом приближении можно найти из соотношений (5). Для нахождения скорости реакции (8) используется диффузионно-кинетическая молель (5), (9). Считается, что скорость притока кислорода к частице бора прямо пропорциональна объемной концентрации кислорода, площади поверхности капли, занятой бором. Также в экспериментальных работах отмечается, что скорость воспламенения возрастает при увеличении размера частицы. Константы К, п, т, Е подбираются из условия совпадения рассчитанных минимальных температур воздуха, необходимых для самовоспламенения частиц, с экспериментальными данными из [17-22]. В расчетах E = 13002 K,

 $n = 1, m = 2, d_S^0 = 100$ мкм, K = 198 [23].

Параметры детонации Чепмена–Жуге, рассчитанные по газофазной равновесной и двухфазной моделям (рис. 5, 6), близки при $m_{\rm B}/m_{\rm air} < 0.5$. Из вычислительного эксперимента следует, что диапазон отношений масс бора к массе воздуха, при котором существует высокоскоростная детонация, существенно уже, чем в случае с алюминием и магнием. В состав продуктов сгорания, рассчитанных по однофазной модели (рис. 5б), входят конденсированные компоненты: при избытке окислителя – B_2O_3 , при избытке горючего – BN и B. В окрестности стехиометрии существует узкая зона, в которой состав продуктов сгорания полностью газофазный. В двухфазном расчете в равно-



Рис. 5. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от отношения расходов частиц бора и воздуха: (а)-(в) – см. рис. 1.



Рис. 6. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени (D = 2000 м/с, $m_{\rm B}/m_{\rm Air} = 0.1$): 1-6 – см. рис. 2; $7 - m_{\rm B} \times 10^8$ кг в частице, $8 - m_{\rm B,O_2} \times 10^8$ кг в частице.

весном составе присутствует только конденсированный нитрид бора при $m_{\rm B}/m_{\rm Air} > 0.3$.

На рис. 6 приведены зависимости параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении бор/воздух, близком к стехиометрическому, от лабораторного времени. Расчет проводился до достижения состояния термодинамического равновесия. Скоростное и температурное равновесия (кривые 1-4) наступало примерно через 30 мкс. На графике температуры

Таблица 1. Частичное и полное равновесие. Алюминий + воздух

Величина	Равновесие	$m_{\rm Al}/m_{\rm Air}$					
		0.6	0.8	1.2	1.6	2.0	
<i>d_S</i> , мкм	Частичное	0.66	0.63	0.59	0.82	0.9	
	Полное	0.63	0.47	0.37	0.04	0.008	
<i>Т</i> , К	Частичное	3375	3225	3245	3245	3245	
	Полное	3425	3057	3050	3105	3071	
<i>Р</i> , МПа	Частичное	2.80	2.59	2.66	2.73	2.56	
	Полное	2.74	2.46	2.35	2.1	1.86	
AlN*	Частичное	0	0.1	0.14	0.23	0.34	
	Полное	0	0.09	0.26	0.37	0.39	
Al*	Частичное	0	0.06	0.27	0.25	0.23	
	Полное	0	0	0	0.02	0.11	
Al ₂ O	Частичное	0.35	0.25	0.13	0.08	0.04	
	Полное	0.40	0.45	0.44	0.39	0.34	

частиц (кривая 4) имеется полочка, соответствующая температуре плавления бора. Расход частиц в процессе расчета сначала увеличивался из-за реакции окисления бора и образования оксида бора (кривые 7, 8), а затем уменьшался до нуля, так как весь бор переходил в оксид бора, который испарялся (кривая 8). В газовой фазе при этом твердая фаза отсутствует. Необходимо отметить, что экспериментальных данных о детонации в смеси дисперсных частиц бора с воздухом нет, полученные численные результаты, соответственно, носят качественный характер.

Особенности структуры волны детонации при избытке частиц металла. При численном исследовании детонации смесей алюминия с воздухом (табл. 1) и бора с воздухом (табл. 2) при избытке металла полное равновесие наступает на значительных расстояниях от ударной волны. Вблизи волны наблюдается состояние частичного равновесия, которое, по-видимому, более соответствует реальным значениям параметров, достигаемым при детонации. Так для смеси алюминий-воздух температура и давление в состоянии частичного равновесия на 4-7% выше, чем при полном, диаметр частиц и концентрация мелкодисперсного алюминия существенно больше. Это связано с частичным испарением алюминия и окисла алюминия и, как следствие, образованием Al₂O в потоке, а также с конденсацией нитрида алюминия (AlN).

Для смеси бор + воздух (табл. 2) при переходе от состояния частичного равновесия к полному наблюдается существенный рост температуры от 15 до 60%, связанный с конденсацией нитрида бора. Данный факт указывает на то, что наблюда-

Таблица 2. Частичное и полное равновесие. Бор + воздух

Величина	Равновесие	$m_{ m B}/m_{ m Air}$					
		0.3	0.5	1.8	1.0	1.4	
<i>d_S</i> , мкм	Частичное	0.86	1.0	1.0	1.0	1.0	
	Полное	0.64	0.73	0.77	0.78	0.8	
<i>Т</i> , К	Частичное	2675	2355	2314	2175	1845	
	Полное	3090	3060	3036	3035	2961	
<i>Р</i> , МПа	Частичное	2.60	2.43	1.50	1.47	1.27	
	Полное	1.9	1.66	1.44	1.62	1.64	
BN*	Частичное	0	0	0	0	0	
	Полное	0.12	0.27	0.45	0.54	0.7	
B_2O_2	Частичное	0	0	0	0	0	
	Полное	0.27	0.25	0.23	0.22	0.2	

2019

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 57 № 4

емая температура при детонации частиц бора в воздухе (с избытком бора) должна быть существенно ниже, чем предсказывает равновесная теория.

Необходимо отметить, что детонация горючих смесей частиц металлов в воздухе является чрезвычайно сложным многомерным процессом [1–34], который может быть адекватно описан только с использованием средств многомерного моделирования, элементом которого являются приведенные в работе физико-математическая модель и вычислительные алгоритмы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная в работе физико-математическая модель апробирована в широком диапазоне отношений начальных массовых расходов частиц алюминия, магния и бора в воздухе. Расчетным путем получена тонкая структура стационарной детонационной волны, включающая нагрев, плавление, испарение, воспламенение и изменение состава частиц, воспламенение и соответствующее изменение состава газофазных продуктов сгорания, образование мелкодисперсных частиц алюминия, магния и бора, а также их оксидов и нитридов.

Исследовано влияние массового расхода частиц металлов на минимальную скорость стационарной детонации. Показано, что параметры стационарной детонационной волны асимптотически стремятся к равновесным значениям – точке на равновесной детонационной адиабате. При избытке алюминия и бора в воздухе может реализоваться состояние частичного равновесия, параметры в котором заметно отличаются от соответствующих параметров при полном равновесии. В целом показано, что разработанная модель является физически непротиворечивой и внутренне согласованной, которая позволяет получать результаты, качественно совпалающие (в ряле случаев и количественно) с экспериментальными ланными.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием № 9.7555.2017/БЧ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Похил П.Ф., Беляев А.Ф., Фролов Ю.В., Логачаев В.С., Коротков А.И. Горение порошкообразных металлов в активных средах. М.: Наука, 1972. 294 с.
- Митрофанов В.В. Детонация гомогенных и гетерогенных систем. Новосибирск: Изд-во Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2003. 200 с.
- 3. *Медведев А.Е., Федоров А.В., Фомин В.М.* Описание горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды // ФГВ. 1984. Т. 20. № 2. С. 3.

- Гремячкин В.М., Истратов А.Г., Лейпунский О.И. Модель горения мелких капель металла // ФГВ. 1975. Т. 11. № 3. С. 366.
- Дрегалин А.Ф., Зенуков И.А., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергоустановках / Под ред. Алемасова В.Е. Изд-во Казанского университета, 1985. 263 с.
- 6. *Федоров А.В., Фомин В.М., Хмель Т.А.* Гетерогенная детонация. В кн.: Законы горения / Под ред. Полежаева Ю.В. М.: Энергомаш, 2006. С. 276.
- 7. Физика взрыва / Под ред. Орленко Л.П. Т. 1. М.: Физматлит, 2004. 832 с.
- Ягодников Д.А. Воспламенение и горение порошкообразных металлов. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. 432 с.
- 9. *Ильин А.П., Громов А.А.* Горение порошков алюминия и бора в сверхтонком состоянии. Томск: ТГУ, 2002. 154 с.
- 10. *Афанасьева Е.А., Левин В.А.* Воспламенение и горение частиц алюминия за ударными и детонационными волнами // ФГВ. 1987. Т. 23. № 1. С. 8.
- Кратова Ю.В., Федоров А.В., Хмель Т.А. Особенности ячеистой детонации в полидисперсных газовзвесях частиц алюминия // ФГВ. 2011. Т. 47. № 5. С. 85.
- Кратова Ю.В., Хмель Т.А., Федоров А.В. Осесимметричная расширяющаяся гетерогенная детонация в газовзвесях частиц алюминия // ФГВ. 2016. Т. 52. № 1. С. 84.
- 13. *Гидаспов В.Ю*. Численное моделирование стационарных детонационных волн в смеси частиц алюминия с воздухом // Труды МАИ. 2011. № 49.
- 14. Попов В.Н., Федоров А.В., Шульеин А.В. Численное моделирование воспламенения частицы магния в неоднородном тепловом поле // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 6. С. 109.
- Авдеев К.А., Фролов Ф.С., Басевич А.А., Фролов С.М. Модифицированная модель воспламенения частицы магния // Химическая физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 47.
- 16. Федоров А.В., Тропин Д.А. Математическая модель воспламенения магния в расширенном диапазоне параметров // ФГВ. 2008. Т. 44. № 5. С. 64.
- Андреев М.А., Степанов А.М. Инициированная детонация в аэровзвеси металлических частиц // ФГВ. 1986. Т. 22. № 1. С. 103.
- 18. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом // Труды МАИ. 2013. № 66.
- Гремячкин В.М., Истратов А.Г., Лейпунский О.И. К теории горения частицы бора в кислороде при высоких температурах // ФГВ. 1979. Т. 15. № 6. С. 5.
- 20. *Гуревич М.А., Кирьянов И.М., Озеров Е.С.* Горение одиночных частиц бора // ФГВ. 1969. Т. 5. № 2. С. 217.
- Давидчук Е.Л., Димитров В.И., Рафалович М.Л., Тулупов Ю.И., Славинская Н.А. Кинетика горения бора в сухом воздухе // ФГВ. 1991. Т. 27. № 1. С. 45.
- 22. Давидчук Е.Л., Димитров В.И., Залож В.А., Славинская Н.А., Тулупов Ю.И. Коэффициенты переноса продуктов горения бора в сухом воздухе // ФГВ. 1991. Т. 27. № 1. С. 52.

- 23. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом // Труды МАИ. 2016. № 91.
- 24. Рашковский С.А., Милёхин Ю.М., Федорычев А.В. Влияние распределенного подвода воздуха в камеру дожигания ракетно-прямоточного двигателя на полноту сгорания частиц бора // ФГВ. 2017. Т. 53. № 6. С. 38.
- 25. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях // Вестник МАИ. М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. Т. 16. № 2. С. 51.
- 26. Ленкевич Д.А., Головастов С.В., Голуб В.В., Бочарников В.М., Бивол Г.Ю. Параметрическое исследование распространения детонации в узких каналах, заполненных смесью пропан-бутан-кислород // ТВТ. 2014. Т. 52. № 6. С. 916.
- 27. Бивол Г.Ю., Головастов С.В., Голуб В.В. Формирование пересжатой волны детонации в потоке метано-кислородных смесей в канале переменного сечения // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 576.
- 28. Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Стрельцов В.Ю. Численное моделирование течений реагирующих газокапельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола // ТВТ. 1998. Т. 36. № 3. С. 424.
- 29. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Численное моделирование экспериментов по определению времени

задержки воспламенения за падающими ударными волнами // ФГВ. 2013. Т. 49. № 4. С. 31.

- 30. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Численное моделирование тонкой структуры цилиндрической детонационной волны в водородно-воздушной горючей смеси // ТВТ. 2015. Т. 53. № 4. С. 556.
- 31. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Численное моделирование детонации пропано-воздушной горючей смеси с учетом необратимых химических реакций // ТВТ. 2017. Т. 55. № 5. С. 795.
- 32. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Северина Н.С. Численное исследование влияния капель воды на структуру детонационной волны в водородо-воздушной горючей смеси // ТВТ. 2018. Т. 56. № 5. С. 829.
- 33. Лунев В.В. Течение реальных газов с большими скоростями. М.: Физматлит, 2007. 760 с.
- 34. *Франк-Каменецкий А.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967.
- 35. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. М.: Изд-во АН СССР, 1944.
- Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х томах / Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. М.: Наука, 1982.
- Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Некоторые задачи физической газовой динамики. М.: Изд-во МАИ, 2016. 196 с.
- 38. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 592 с.