

УДК 519.6;51-74

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ПЕРЕОБОГАЩЕННОЙ АЛЮМИНИЕВО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ НА ОСНОВЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ ПРОЦЕССОВ

А. Ю. Крюков, В. И. Малинин

Пермский политехнический университет, 614990 Пермь alexkryukov@list.ru, malininvi@mail.ru

Представлены результаты математического моделирования горения потока полифракционной аэровзвеси порошка алюминия с учетом неравновесности процесса. Расчеты выполнены при значениях коэффициента избытка воздуха $\alpha = 0.1 \div 0.5$. Получены зависимости от времени термодинамических параметров, полноты сгорания частиц металла, относительного времени нахождения фракций в потоке. Обоснована адекватность описания термодинамических процессов по используемой неравновесной модели путем сравнения с равновесной при времени, стремящемся к ∞ . Проанализирована и доказана необходимость учета образования субоксида Al_2O в рассматриваемом диапазоне значений коэффициента избытка воздуха. Необходимость учета реакции азотирования в математическом моделировании при $0.1 \leq \alpha < 0.4$ аргументирована путем сопоставления данных расчетов по равновесной и неравновесной термодинамике.

Ключевые слова: математическое моделирование, горение, аэровзвесь, алюминий, субоксиды, кинетика, равновесная и неравновесная термодинамика.

DOI 10.15372/FGV20180107

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия показана возможность создания новых высокоэффективных технических устройств, использующих горение распыленных в активном газе металлических порошков для получения нано- и ультрадисперсных материалов (технологические реакторы синтеза оксидов металлов) и создания реактивных двигательных установок, работающих на порошкообразных металлических горючих [1–12]. Математическое моделирование воспламенения и сгорания аэровзвесей порошков металлов является актуальным направлением современной теории горения газодисперсных систем, имеющей большое прикладное значение для анализа внутрикамерных процессов в вышеуказанных устройствах.

Особенностью устройств, описанных в [1–9], является разделение процесса сжигания распыленного металлического порошка на две стадии: 1) воспламенение и первичное горение газозвеси частиц металла при коэффициенте избытка окислителя $\alpha < 0.5$; 2) дожигание продуктов первичного горения при избытке окислителя более единицы. Таким образом, первичное горение осуществляется при значительном переобогащении горючей смеси. В дан-

ной работе рассматривается первичное горение аэровзвеси промышленного полифракционного порошка алюминия АСД-1. В расчетах процессов горения переобогащенной алюминиево-воздушной смеси необходимо учитывать образование не только основного конечного продукта реакции — оксида Al_2O_3 , но и промежуточных — субоксидов Al_2O и AlO .

Образование субоксидов алюминия учитывается во многих моделях горения алюминия, например в [13–15], где исследовалось горение одиночных частиц. Однако реальные рабочие процессы в технологических и двигательных установках реализуются при горении промышленных полифракционных порошков металла. Моделирование горения полифракционных порошков металлов подробно описано в монографии [6], в том числе и для переобогащенных смесей. К сожалению, модель горения алюминия, приведенная в этой работе, не учитывает образования субоксидов. Образование субоксидов алюминия рассмотрено в математической модели, представленной в работах [16–18], которая учитывает кинетику и неравновесную термодинамику химических реакций на поверхности частиц и в объеме потока, а также температурную и скоростную неравновесность между частицами и газом. Однако в этих работах не приведен анализ содержания субоксидов AlO

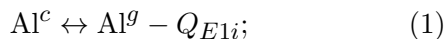
и Al_2O в продуктах сгорания и их влияния на горение. Также в них нет сравнения рассчитанных неравновесных параметров с параметрами равновесной термодинамики.

В представленной работе на основе модели [16–18] проведены расчеты содержания субоксидов в продуктах сгорания в зависимости от коэффициента избытка воздуха α и дано сравнение неравновесных параметров с параметрами равновесной термодинамики.

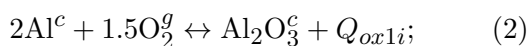
I. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ДОПУЩЕНИЯ

Основные положения и допущения соответствуют модели [16–18], в которой приняты представления и допущения работы [15], кроме предположения о термодинамическом равновесии на поверхности частицы. Рассматривается течение реагирующей смеси частиц и газа. Поток характеризуется следующими переменными параметрами: скоростью, температурой, плотностью частиц и газа, давлением, концентрацией кислорода, азота, продуктов испарения и химических реакций, количеством крупно- и ультрадисперсной фракций конденсированной фазы. Крупнодисперсная фаза состоит из алюминия и оксида, накопившегося на поверхности частиц в процессе горения, ультрадисперсная фаза — из оксида, образующегося в потоке в результате газозавязанных реакций, продукты испарения — из газообразного алюминия и субоксидов алюминия (Al_2O и AlO). Учитывается скоростная, температурная и химическая неравновесность между крупнодисперсной фазой и газом. Ультрадисперсная фаза находится в скоростном и тепловом равновесии с газом, но не в химическом. Крупнодисперсная фаза представлена совокупностью определенного числа монофракций. Для ультрадисперсной фазы в каждой точке потока определяется удельная поверхность и, соответственно, средний по поверхности размер ее частиц.

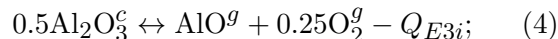
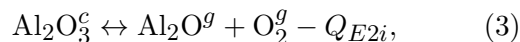
На поверхности частиц алюминия протекают следующие процессы: испарение (конденсация) алюминия на свободной от оксида поверхности (далее по тексту — свободной поверхности):



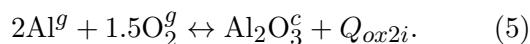
окисление алюминия на свободной поверхности:



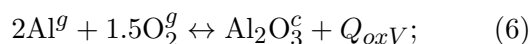
испарение (конденсация) на внешней поверхности оксида, покрывающего частицу (далее по тексту — окисленной поверхности):



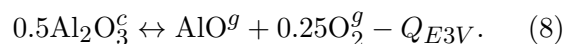
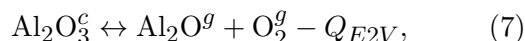
окисление паров алюминия (разложения оксида) на окисленной поверхности:



В потоке на поверхности частиц ультрадисперсного оксида протекают процессы: окисление паров алюминия (разложения) оксида:



испарение (конденсация) оксида:



При записи реакций процессов приняты следующие обозначения: Q_{E1i} — теплота испарения алюминия; Q_{oxji} , Q_{Eji} — теплота реакций окисления алюминия и теплота испарения оксида на поверхности частиц; Q_{oxV} — теплота реакции окисления в объеме потока; Q_{E2V} , Q_{E3V} — теплота процессов испарения (конденсации) оксида в потоке. Значения индексов следующие: $j = 1$ — свободная поверхность, $j = 2$ — поверхность, покрытая оксидом, i — номер фракции, E — испарение, V — процессы в объеме потока.

II. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ ПОТОКА АЭРОВЗВЕСИ АЛЮМИНИЯ

В соответствии с процессами (1)–(8), с принятыми подходом, допущениями и законами сохранения массы, энергии и импульса составлена система уравнений и начальных условий, описывающая воспламенение и горение потока аэровзвеси частиц полифракционного алюминия. Система состоит из дифференциальных уравнений баланса масс алюминия, продукта реакции — оксида, количества частиц, а также энтальпии и импульса, записанных для каждой фракции частиц. Для газового потока записаны уравнения баланса масс газа, газовых компонентов, ультрадисперсного оксида, баланса энергии и импульса. Система дополнена уравнениями состояния идеального газа для каждого компонента и законом Дальтона.

1. Уравнения баланса для частиц i -й фракции

Для массы алюминия, отнесенной к ее начальному значению:

$$V_i \frac{d m_{Al i}}{dx m_{Al i}^0} = - \frac{3r_i^2(2W_{ox1i} + W_{E1i})M_{Al}}{r_{0i}^3 \rho_{Al}^0}; \quad (9)$$

массы оксида на частице, отнесенной ко всей массе оксида, образующегося при полном сгорании частицы алюминия:

$$V_i \frac{d m_{ci}}{dx m_{ci}^F} = \frac{6r_i^2(W_{ox1i} + W_{ox2i} - W_{E2i} - 0.5W_{E3i})M_c}{r_{0i}^3 \rho_{Al}^0}; \quad (10)$$

энтальпии (алюминий в твердой или жидкой фазе):

$$V_i \frac{dT_i}{dx} = \frac{1}{r_{0i}^3 \rho_{Al}^0} \times \\ \times 3r_i^2 [W_{ox1i} Q_{ox1i} + W_{ox2i} Q_{ox2i} - W_{E1i} Q_{E1i} - \\ - W_{E2i} Q_{E2i} - W_{E3i} Q_{E3i} - \alpha_i (T_i - T_g)] / \\ / \left[\frac{m_{Al i}}{m_{Al i}^0} C_{pAl i} + \frac{m_{ci}}{m_{ci}^F} C_{pc, i} \frac{M_c}{2M_{Al}} \right], \\ T_i \neq 934 \text{ K}, \quad f_i = 0 \text{ или } f_i = 1;$$

энтальпии (алюминий плавится):

$$V_i \frac{df_i}{dx} = \\ = 3r_i^2 [W_{ox1i} Q_{ox1i} + W_{ox2i} Q_{ox2i} - W_{E1i} Q_{E1i} - \\ - W_{E2i} Q_{E2i} - W_{E3i} Q_{E3i} - \alpha_i (T_i - T_g)] / \\ / [r_{0i}^3 \rho_{Al}^0 (m_{Al i} / m_{Al i}^0) q_f], \\ T_i = 934 \text{ K}, \quad 0 < f_i < 1;$$

уравнение сохранения количества частиц i -й фракции:

$$\frac{d}{dx} (V_i N_i) = 0. \quad (13)$$

2. Уравнения баланса для газового потока

Для массы кислорода:

$$\frac{d}{dx} (\rho_{ox} V_g) = -(J_{ox}^1 + J_{ox}^2 + J_{ox}^v); \quad (14)$$

массы паров алюминия:

$$\frac{d}{dx} (\rho_{V1} V_g) = J_{V1}^1 - J_{V1}^v; \quad (15)$$

массы Al_2O :

$$\frac{d}{dx} (\rho_{V2} V_g) = J_{V2}^2 + J_{V2}^v; \quad (16)$$

массы AlO :

$$\frac{d}{dx} (\rho_{V3} V_g) = J_{V3}^2 + J_{V3}^v; \quad (17)$$

массы ультрадисперсного оксида, образовавшегося в объеме потока:

$$\frac{d}{dx} (\rho_c^V V_g) = J_{ox}^V + J_{V1}^V - J_{V2}^V - J_{V3}^V; \quad (18)$$

массы газа, включая массу ультрадисперсного оксида:

$$\frac{d}{dx} (\rho_g^* V_g) = -J_{ox}^1 - J_{ox}^2 + J_{V1}^1; \quad (19)$$

энергии газа:

$$V_g \frac{dT_g}{dx} = \frac{J_Q}{C_{pg}^* \rho_g^*} - \frac{V_g^2}{C_{pg}^*} \frac{dV_g}{dx} - \sum_i \frac{\rho_i V_i^2}{C_{pg}^* \rho_g^*} \frac{dV_i}{dx}; \quad (20)$$

здесь и далее значком * обозначены параметры, определенные с учетом ультрадисперсных частиц.

3. Уравнения движения

Для частиц i -й фракции:

$$V_i \frac{dV_i}{dx} = \frac{3}{8} \rho_g r_i^2 C_{Di} (V_g - V_i) |V_g - V_i| / \\ / r_{0i}^3 \rho_{Al} \left(\frac{m_{Al i}}{m_{Al i}^0} + \frac{m_{ci}}{m_{ci}^F} \frac{M_c}{2M_{Al}} \right); \quad (21)$$

газа:

$$(1 - M^2) \frac{dV_g}{dx} = \frac{J_Q}{\rho_g^* C_{pg}^* T_g} + \frac{1}{\rho_g} \sum_k \frac{M_g}{M_k} \frac{d(\rho_k V_k)}{dx} + \\ + \sum_i \frac{\rho_i V_i V_g}{p} \left(1 - \frac{V_i}{V_g} \frac{R_g^*}{C_{pg}^*} \right) \frac{dV_i}{dx}, \quad (22)$$

индекс k относится к компонентам газового потока.

4. Начальные условия

$$\begin{aligned}
 x = 0: \quad m_{\text{Al}i} &= m_{\text{Al}i}^0, \quad m_{\text{c}i} = m_{\text{c}i}^0, \quad T_i = T_{0i}, \\
 f_i &= 0, \quad V_i N_i = (V_i N_i)_0, \\
 \rho_{\text{ox}} V_g &= (\rho_{\text{ox}} V_g)_0, \\
 \rho_{V1} V_g &= (\rho_{V1} V_g)_0, \quad \rho_{V2} V_g = (\rho_{V2} V_g)_0, \\
 \rho_{V3} V_g &= (\rho_{V3} V_g)_0, \quad \rho_c^V V_g = (\rho_c^V V_g)_0, \\
 \rho_g^* V_g &= (\rho_g^* V_g)_0, \quad T_g = T_{0g}, \\
 V_i &= V_{0i}, \quad V_g = V_{0g}.
 \end{aligned} \tag{23}$$

5. Уравнения состояния и замыкающие соотношения

Уравнение состояния идеального газа, записанное для каждого газового компонента:

$$p_k = \rho_k R_k T_g, \quad k = 1, 2, \dots, m; \tag{24}$$

закон Дальтона:

$$p = \sum_k p_k. \tag{25}$$

В системе уравнений (9)–(23) использованы обозначения:
радиус частиц i -й фракции:

$$r_i = \begin{cases} r_{0i}, & T_i \leq 2327 \text{ K}, \\ r_{0i} \left[\frac{\rho_{\text{Al}}^0}{\rho_{\text{Al}i}} \left(\frac{m_{\text{Al}i}}{m_{\text{Al}i}^0} + \frac{m_{\text{c}i}}{m_{\text{c}i}^F} \frac{\rho_{\text{Al}i}}{\rho_{\text{c}i}} \frac{M_c}{2M_{\text{Al}}}} \right) \right]^{1/3}, & 2327 < T_i < 2700 \text{ K}, \end{cases} \tag{26}$$

где ρ_{Al} , ρ_c — плотность соответственно алюминия и его оксида в зависимости от температуры (определены по данным [19, 20]), M — молярная масса, m — молярная доля; плотность i -й фракции в потоке:

$$\rho_i = \frac{4}{3} \pi r_{0i}^3 \rho_{\text{Al}}^0 \left(\frac{m_{\text{Al}i}}{m_{\text{Al}i}^0} + \frac{m_{\text{c}i}}{m_{\text{c}i}^F} \frac{M_c}{2M_{\text{Al}}} \right) N_i; \tag{27}$$

теплоемкость газовой смеси при постоянном давлении (с учетом ультрадисперсного оксида):

$$C_{pg}^* = \sum_k \frac{\rho_k}{\rho_g^*} C_{pk} + \frac{\rho_c^V}{\rho_g^*} C_p^V; \tag{28}$$

число Маха, скорость звука в потоке и показатель адиабаты газовой смеси:

$$M = \frac{V_g}{a}, \quad a = \sqrt{k R_g^* T_g}, \quad k = \frac{C_{pg}^*}{C_{pg}^* - R_g^*}; \tag{29}$$

газовая постоянная и молекулярная масса газовой смеси:

$$R_g^* = \frac{R}{M_g} \frac{\rho_g}{\rho_g^*}, \quad M_g = \sum_k \frac{M_k p_k}{p}. \tag{30}$$

6. Скорости химических реакций и фазовых переходов

Для замыкания системы (9)–(30) необходимо определить скорости химических реакций и фазовых переходов W_{ji}^l на свободной и окисленной поверхностях и на поверхности ультрадисперсных частиц в газовом потоке. Соответственно необходимо определить интенсивности массо- и теплообмена между газовой и конденсированной фазами в единице объема потока J_k^l и J_Q ($l = 1, 2, V$).

При выводе соотношений для определения потоков массы и тепла к поверхности и от поверхности частиц будем исходить из следующих положений:

— скорости процессов на поверхности крупнодисперсной и ультрадисперсной фракций должны описываться похожими математическими выражениями, но в выражении для скоростей на поверхности ультрадисперсных частиц из-за их малого размера можно пренебречь диффузионным сопротивлением по сравнению с кинетическим;

— скорости процессов на всех поверхностях должны ограничиваться количеством столкновений молекул (атомов) с поверхностью в единицу времени;

— процессы, описываемые уравнениями (1) и (3)–(8), обратимы и могут идти как в прямом, так и обратном направлении со скоростями, которые описываются одинаковыми выражениями;

— равновесные значения давления компонентов у поверхности связаны известными термодинамическими соотношениями с избыточным давлением компонентов у поверхности; избыточное давление определяется стехиометрией молярных потоков компонентов у поверхности.

Таким образом, скорости процессов на поверхности определяются следующим образом.

Молярные скорости реакций образования оксида (рассчитаны на единицу площади поверхности):

$$W_{ox1i} = k_{ox1i} \frac{p_{oxi}^s}{RT_i} \text{ — на свободной поверхности,}$$

$$W_{ox2i} = k_{ox2i} \frac{p_{oxi}^s - p_{oxi}^e}{RT_i} \text{ — на окисленной поверхности,}$$

$$W_{oxV} = k_{oxV} \frac{p_{ox} - p_{ox}^e}{RT_g} \text{ — на поверхности ультрадисперсных частиц в потоке.}$$

Константы скоростей реакций окисления:

$$k_{ox1i} = (1/6)U_{oxi}\beta_i\varphi_1 \text{ — на свободной поверхности,}$$

$$k_{ox2i} = (1/6)U_{oxi}(1 - \beta_i)\varphi_2 \text{ — на окисленной поверхности,}$$

$$k_{oxV} = (1/6)U_{ox}\varphi_2 \text{ — на поверхности ультрадисперсных частиц в потоке.}$$

Здесь U_{oxi} , U_{ox} — средние скорости молекул кислорода у поверхности частиц и в потоке; φ_1 , φ_2 — коэффициенты эффективности соударений в химических реакциях (коэффициенты аккомодации) — на поверхности алюминия и оксида; β_i — доля поверхности, свободной от оксида.

Доля поверхности частиц i -й фракции, свободной от оксида, в соответствии с допущениями, указанными в работах [16–18], определяется следующим образом:

$$\beta_i = \begin{cases} A_0 \exp(-A_1/T_i), & T_i < T_{igni} < T_{cf}, \\ 0.5, & T_{igni} < T_i \leq T_{cf}, \\ \frac{\omega_i^{2/3}}{1 + \omega_i^{2/3}}, & T_i > T_{cf}, \end{cases} \quad (31)$$

где ω_i — отношение объемов алюминия и оксида на i -й частице, A_0 , A_1 — константы предпламенного окисления, T_{igni} — температура воспламенения i -й частицы, T_{cf} — температура плавления оксида.

Сравнением времени задержки воспламенения частицы Al при разных температурах среды ($T_\infty = 1600 \div 3000$ К, размер частицы $d = 70$ мкм), измеренных в экспериментах, результаты которых приведены в монографии [21], с временем задержки, рассчитанным по данной модели, определены константы предпламенного окисления: $A_0 = 5.5$ и $A_1 = 18200$. Адекватность описания воспламенения и горения алюминия при помощи указанных констант обоснована в работе [22], где сравнивались измеренные в экспериментах [21] и рас-

считанные по данной модели времена горения в зависимости от давления, размера частиц и содержания окислителя в среде.

Отношение объемов алюминия и оксида на i -й частице:

$$\omega_i = \frac{(m_{Al}/m_{Al}^0)(\rho_{ci}/\rho_{Al})}{(m_{ci}/m_{ci}^F)(M_c/2M_{Al})}. \quad (32)$$

Температура воспламенения является функцией радиуса частицы r_i и молярной доли кислорода в среде m_{ox} . Вид зависимости $T_{igni}(r_i, m_{ox})$ получается интерполяцией экспериментальных результатов работы [23].

Молярные скорости испарения (конденсации) (рассчитаны на единицу площади поверхности):

$$W_{E1i} = \frac{W_{E1i}^K - 2W_{ox2i}}{1 + B_1} + 2W_{ox2i} \text{ — алюминия на свободной поверхности,}$$

$$W_{E2i} = \frac{W_{E2i}^K}{1 + B_2} \text{ — Al}_2\text{O на окисленной поверхности,}$$

$$W_{E3i} = \frac{W_{E3i}^K}{1 + B_3} \text{ — AlO на окисленной поверхности,}$$

$$W_{EV2} = W_{EV2}^K \text{ — Al}_2\text{O на поверхности ультрадисперсных частиц,}$$

$$W_{EV3} = W_{EV3}^K \text{ — AlO на поверхности ультрадисперсных частиц.}$$

Кинетические скорости испарения (конденсации):

$$W_{E1i}^K = \frac{1}{4} \alpha_{E1} U_{V1i} \beta_i \frac{p_{V1i}^e - p_{V1}}{RT_i} \text{ — алюминия на свободной поверхности,}$$

$$W_{E2i}^K = \frac{1}{4} \alpha_{E2} U_{V2i} (1 - \beta_i) \frac{p_{V2i}^e - p_{V2}}{RT_i} \text{ — Al}_2\text{O на окисленной поверхности,}$$

$$W_{E3i}^K = \frac{1}{4} \alpha_{E3} U_{V3i} (1 - \beta_i) \frac{p_{V3i}^e - p_{V3}}{RT_i} \text{ — AlO на окисленной поверхности,}$$

$$W_{EV2}^K = \frac{1}{4} \alpha_{E2} U_{V2} \frac{p_{V2}^e - p_{V2}}{RT_g} \text{ — Al}_2\text{O на поверхности ультрадисперсных частиц,}$$

$$W_{EV3}^K = \frac{1}{4} \alpha_{E3} U_{V3} \frac{p_{V3}^e - p_{V3}}{RT_g} \text{ — AlO на поверхности ультрадисперсных частиц.}$$

Здесь B_1 , B_2 , B_3 — параметры, характеризующие соотношение между интенсивностью фазового перехода и интенсивностью отвода продуктов испарения от поверхности в среду; U_{V1i} , U_{V2i} , U_{V3i} , U_{V1} , U_{V2} , U_{V3} — средние скорости атомов Al, молекул Al₂O, AlO у

поверхности частиц и в потоке соответственно; α_{E1} , α_{E2} , α_{E3} — коэффициенты испарения (конденсации) Al, Al₂O, AlO.

7. Массовые потоки компонентов и тепла

$J_{Ox}^1 = 1.5M_{Ox} \sum_i 4\pi r_i^2 N_i W_{Ox1i}$ — кислорода к

свободной поверхности частиц,

$J_{Ox}^2 = M_{Ox} \sum_i 4\pi r_i^2 N_i (1.5W_{Ox2i} - W_{E2i} -$

$0.25W_{E3i})$ — кислорода к окисленной поверхности частиц,

$J_{Ox}^V = (1.5W_{OxV} - W_{EV2} - 0.25W_{EV3})M_{Ox}F_c^V$ — кислорода к поверхности ультрадисперсных частиц,

$J_{V1}^1 = M_{Al} \sum_i 4\pi r_i^2 N_i W_{E1i}$ — паров алюминия

к (от) свободной поверхности частиц,

$J_{V1}^V = 2M_{Al}W_{OxV}F_c^V$ — паров алюминия к поверхности ультрадисперсных частиц для реакции окисления,

$J_{V2}^2 = M_{V2} \sum_i 4\pi r_i^2 N_i W_{E2i}$ — Al₂O к (от)

окисленной поверхности частиц,

$J_{V3}^2 = M_{V3} \sum_i 4\pi r_i^2 N_i W_{E3i}$ — AlO к (от) окис-

ленной поверхности частиц,

$J_{V2}^V = M_{V2}W_{EV2}F_{cN}^V$ — Al₂O к (от) поверхности ультрадисперсных частиц,

$J_{V3}^V = M_{V3}W_{EV3}F_{cN}^V$ — AlO к (от) поверхности ультрадисперсных частиц,

$J_Q = \sum_i 4\pi r_i^2 N_i \alpha_i (T_i - T_g)(W_{OxV}Q_{OxV} +$

$W_{EV2}Q_{E2V} + W_{EV3}Q_{E3V})F_c^V$ — поток тепла от конденсированной фазы к газу.

Площадь поверхности ультрадисперсных частиц в единице объема потока аэрозвеси F_c^V можно выразить через плотность оксида в потоке ρ_c^V , удельную поверхность ультрадисперсных частиц после полного сгорания алюминия F_{sp} (определяется в эксперименте по сжиганию аэрозвеси частиц Al) и параметр S_c^V , который характеризует накопление оксида в объеме потока в текущий момент времени: $F_c^V = \rho_c^V F_{sp} / (S_c^V)^{1/3}$.

8. Параметры, характеризующие накопление оксида в текущий момент времени

На частицах металла:

$S_{ci} = m_{ci} / m_{ci}^F$ — на поверхности частиц Al i -й фракции,

$S_c = \sum_i S_{ci} n_i$ — на поверхности всех частиц

Al (n_i — массовая доля частиц i -й фракции в исходном порошке Al).

В объеме потока:

$$S_c^V = \frac{\rho_c^V V_g}{\sum_i (4/3)\pi r_{oi}^3 \rho_{Al}^0 (N_i V_i)_0 (M_c / 2M_{Al})}. \quad (33)$$

9. Определение равновесных параметров на поверхности частиц и в потоке

Введем новые параметры — локальные коэффициенты избытка окислителя у окисленной поверхности частиц i -й фракции

$$\alpha_{2i} = \frac{4 J_{Oxi}^s}{3 J_{V1i}^s} = \frac{4 U_{Oxi} p_{Oxi}^s}{3 U_{V1i} p_{V1i}^s},$$

и у поверхности ультрадисперсных частиц в потоке

$$\alpha_V = \frac{4 J_{Ox}^{sV}}{3 J_{V1}^{sV}} = \frac{4 U_{Ox} p_{Ox}}{3 U_{V1} p_{V1}}. \quad (34)$$

Здесь U_{V1} — средняя скорость паров алюминия в потоке, J_{Oxi}^s , J_{V1i}^s , J_{Ox}^{sV} , J_{V1}^{sV} — молярные потоки кислорода и паров алюминия к поверхности частиц i -й фракции и ультрадисперсных частиц для реакции окисления.

В зависимости от значения локальных коэффициентов избытка окислителя (34) у частиц и в потоке возможны три ситуации:

- 1) при $\alpha_{2i} = 1$ ($\alpha_V = 1$) — ни один из компонентов у поверхности (в потоке) не находится в избытке;
- 2) при $\alpha_{2i} < 1$ ($\alpha_V < 1$) — избыток паров алюминия у поверхности (в потоке);
- 3) при $\alpha_{2i} > 1$ ($\alpha_V > 1$) — избыток кислорода у поверхности (в потоке).

Равновесные давления компонентов у поверхности частиц и в потоке зависят от избытка давления кислорода или паров алюминия. Избыточные давления кислорода и паров алюминия у поверхности частиц (p_{Oxi}^{sur} , p_{V1i}^{sur}) и в потоке (p_{Ox}^{sur} и p_{V1}^{sur}) определяются через локальные коэффициенты избытка окислителя:

$$p_{Oxi}^{sur} = p_{Oxi}^s (1 - 1/\alpha_{2i}) = p_{Oxi}^s - \frac{3 U_{V1i}}{4 U_{Oxi}} p_{V1i}^s,$$

$$p_{V1i}^{sur} = p_{V1i}^s (1 - \alpha_{2i}) = p_{V1i}^s - \frac{4 U_{Oxi}}{3 U_{V1i}} p_{Oxi}^s,$$

$$p_{ox}^{sur} = p_{ox}(1 - 1/\alpha_V) = p_{ox} - \frac{3 U_{V1}}{4 U_{ox}} p_{V1}, \quad (35)$$

$$p_{V1}^{sur} = p_{V1}(1 - \alpha_V) = p_{V1} - \frac{4 U_{ox}}{3 U_{V1}} p_{ox}.$$

Если у окисленной поверхности частиц и в потоке пары алюминия присутствуют в избытке или соотношение компонентов стехиометрическое ($\alpha_{2i} \leq 1$, $\alpha_V \leq 1$), то соблюдаются термодинамические соотношения

$$(p_{V1i}^{sur} + p'_{V1i})^2 (p'_{oxai})^3 = k_{5i}, \quad (36)$$

$$(p_{V1}^{sur} + p'_{V1})^2 (p'_{oxa})^3 = k_6,$$

где p'_{V1i} , p'_{V1} , p'_{oxai} , p'_{oxa} — давление паров алюминия и атомарного кислорода (соответственно над окисленной поверхностью и в потоке), образовавшихся в результате разложения оксида; k_{5i} , k_6 — константы равновесия химических реакций (5) и (6) соответственно. Давления p'_{V1i} и p'_{oxai} (соответственно p'_{V1} и p'_{oxa} , p'_{V1}) связаны стехиометрическим отношением молярных потоков у поверхности:

$$\begin{aligned} p'_{V1i} U_{V1i} &= 1.5 p'_{oxai} U_{oxai}, \\ p'_{V1} U_{V1} &= 1.5 p'_{oxa} U_{oxa}, \end{aligned} \quad (37)$$

где U_{oxai} — средняя скорость атомов кислорода у поверхности частиц, U_{oxa} — средняя скорость атомов кислорода в потоке.

Решив трансцендентные уравнения (36) с отношениями (37) относительно p'_{V1i} и p'_{V1} , можно определить равновесные давления паров Al и атомарного кислорода на окисленной поверхности и в потоке с помощью формул (35):

$$\begin{aligned} p_{V1i}^e &= p_{v1i}^{sur} + p'_{V1i}, \\ p_{oxai}^e &= p'_{oxai} = (2/3)(U_{V1i}/U_{oxai})p'_{V1i}, \\ p_{V1}^e &= p_{V1}^{sur} + p'_{V1}, \end{aligned} \quad (38)$$

$$p_{oxa}^e = p'_{oxa} = (2/3)(U_{V1}/U_{oxa})p'_{V1}.$$

Равновесные давления кислорода p_{oxi}^e и p_{ox}^e определяются через равновесные давления атомарного кислорода:

$$p_{oxi}^e = 0.5 p_{oxai}^e, \quad p_{ox}^e = 0.5 p_{oxa}^e. \quad (39)$$

Таким образом, по формулам (38), (39) окончательно определяются равновесные значения давления компонентов у поверхности частиц и в потоке.

Если на окисленной поверхности частиц и в потоке кислород в избытке ($\alpha_{2i} > 1$, $\alpha_V > 1$), то соблюдаются термодинамические соотношения

$$\begin{aligned} (p'_{V1i})^2 (p'_{oxai} + p_{oxai}^{sur})^3 &= k_{5i}, \\ (p'_{V1})^2 (p'_{oxa} + p_{oxa}^{sur})^3 &= k_6, \end{aligned} \quad (40)$$

где p_{oxai}^{sur} , p_{oxa}^{sur} — избыток давления атомарного кислорода (соответственно над окисленной поверхностью и в потоке), определяемый через p_{oxi}^{sur} и p_{ox}^{sur} (35) с помощью термодинамических соотношений, связывающих давления атомарного p_{oxai}^e , p_{oxa}^e и молекулярного p_{oxmi}^e , p_{oxm}^e кислорода. Решив уравнения (40) относительно p'_{oxai} , p'_{oxa} , получим, как и в предыдущем случае, значения равновесных давлений p_{oxai}^e , p_{oxa}^e , p_{V1i}^e , p_{V1}^e , p_{oxmi}^e , p_{oxm}^e , p_{oxi}^e , p_{ox}^e .

Равновесное давление Al на свободной поверхности p_{V1}^{e1} известно из справочной литературы [24], а равновесные давления Al_2O и AlO на окисленной поверхности p_{V2i}^e , p_{V3i}^e и в потоке p_{V2}^e , p_{V3}^e определяются через равновесные давления алюминия и атомарного кислорода (p_{V1i}^{e2} , p_{oxai}^e — на окисленной поверхности, p_{V1}^e , p_{oxa}^e — в потоке) с помощью известных термодинамических соотношений. Определив скорости химических реакций и испарения, можно рассчитать интенсивности массо- и теплообмена между газовой и конденсированной фазами в единице объема аэрозвеси.

Давление компонентов у поверхности частиц определяется путем сложения кинетического и диффузионного сопротивлений. При определении давления кислорода p_{oxi}^s и паров алюминия p_{V1i}^s у поверхности частиц учтено выделение кислорода при испарении Al_2O и AlO с окисленной поверхности и поглощение паров Al при реакции образования оксида на окисленной поверхности (в соответствии с уравнениями химических реакций (3)–(5)). Таким образом, определены все соотношения для расчета неравновесной термодинамики процессов горения полифракционной аэрозвеси частиц алюминия.

10. Коэффициенты переноса

Коэффициенты переноса (теплопроводности, диффузии, вязкости) определяли при средних температурах газовой смеси вокруг горящих частиц металла. Коэффициенты диффузии определены в соответствии с данными, приведенными в [25]. Остальные коэффициенты переноса определены в соответствии со справочником [26]. Значения теплот плавления, испарения и химических реакций, удельной теплоемкости компонентов при постоянном давлении и константы равновесия определены в соответствии с [24].

III. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Исходный порошок алюминия (АСД-1) по размерам частиц разбивается на несколько монофракций. Система обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка (9)–(23) интегрируется методом Рунге — Кутты четвертого порядка точности по продольной координате потока x . Интегрирование выполняется от начальной координаты x_0 до заданной x_F .

Отдельная i -я фракция считается выгоревшей, если ее полнота сгорания $\varphi_{icom} \geq 0.999$:

$$\varphi_{icom} = 1 - m_{Al_i}/m_{Al_i}^0.$$

В этом случае на поверхности частиц этой фракции скорости реакций окисления W_{ox1i} и испарения W_{E1i} алюминия считаются равными нулю. Масса свободного алюминия в оксидном остатке от сгоревшей частицы тоже равна нулю. Но уравнения баланса энтальпии, массы оксида, движения оксидных остатков, уравнения сохранения количества оксидных остатков продолжают численно интегрироваться до конца расчета.

При интегрировании, наряду с прочими параметрами, вычислялось время пребывания i -й фракции в потоке частиц

$$\tau_i^{np} = \int_0^x \frac{dx}{V_i}$$

и в потоке выделенного объема газа

$$\tau_g^{np} = \int_0^x \frac{dx}{V_g}.$$

Интегрирование системы (9)–(23) позволяет к моменту окончания расчета определить долю оксида:

$\sigma_i = S_{Ci}|_{t=t_{com}}$ — на поверхности частицы i -й фракции,

$\sigma = S_C|_{t=t_{com}}$ — на поверхности всех частиц; долю ультрадисперсных частиц в объеме потока (по формуле (33))

$$\sigma_V = S_c^v|_{t=t_{com}};$$

описать изменение характерных параметров в процессе горения, определить по формулам (31), (32) доли поверхности частиц, свободной от оксида, установить особенности механизма горения аэровзвеси алюминия.

Для упрощения расчетов приняты равными эффективности соударений в химических реакциях как на поверхности алюминия, так и на поверхности оксида: $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_s$. Можно принять $\varphi_s = 0.1$, так как при таком значении результаты расчетов [22] удовлетворительно согласуются с результатами экспериментов [21].

В расчетах величина F_{sp} на основе результатов экспериментов [1] принята равной $14 \text{ м}^2/\text{г}$. Коэффициент испарения (конденсации) алюминия $\alpha_{E1} = 1$, так как это легко испаряемый металл. Коэффициенты испарения (конденсации) Al_2O , AlO приняты в соответствии с работой [18]: $\alpha_{E2} = \alpha_{E3} = 0.0025$.

Коэффициенты аккомодации φ_1 , φ_2 и коэффициенты испарения α_{E2} , α_{E3} с поверхности оксида, естественно, требуют уточнения. Однако кинетические ограничения скоростей процессов должны сохраняться и при их предельных значениях, равных единице.

IV. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ И РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Исследования горения потока полифракционной аэровзвеси порошка алюминия промышленной марки АСД-1 выполнены при $\alpha = 0.1 \div 0.5$. Интегральное распределение массы порошка по размерам частиц представлено, например, в работах [16, 18]. При расчетах использована описанная выше модель неравновесной термодинамики, а также программа «Астра» [27] — для расчета в равновесных условиях. Начальные значения параметров для расчета по неравновесной модели приведены в табл. 1.

Характеристики процессов горения смеси алюминия и воздуха, полученные модели-

Таблица 1

Начальные значения параметров при расчете по неравновесной модели

Фаза	Массовая доля	Радиус частиц, мкм	Температура, К	Скорость, м/с	
Дисперсная фракция	1	0.05	2.6	1 250	10
	2	0.05	4.2	1 250	10
	остальные	0.90	5.7 ÷ 31.2	300	10
Газовая	—	—	1 250	20	

Таблица 2

Параметры процесса горения

Учет реакции азотирования в расчетах	α	Равновесная модель				Неравновесная модель (при $\tau \rightarrow \infty$)			
		T_T , К	z_T , %	R_T , Дж/(кг·К)	k_T	T_g , К	z , %	R_g , Дж/(кг·К)	k
Без учета	0.1	1 997	78.1	290	1.30	1 980	77.3	290	1.29
	0.2	2 302	48.5	239	1.26	2 310	48.4	237	1.26
	0.3	2 335	28.2	225	1.25	2 338	27.7	225	1.25
	0.5	3 040	19.6	238	1.26	3 050	19.8	240	1.26
С учетом	0.1	2 754	59.8	173	1.24	—	—	—	—
	0.2	2 685	27.4	189	1.23	—	—	—	—
	0.3	2 646	19.8	207	1.24	—	—	—	—
	0.5	3 039	19.6	240	1.26	—	—	—	—

Примечание. R_g — газовая постоянная смеси, T_g — температура газового потока, z — доля конденсированной фазы, k — показатель адиабаты смеси, индексом T обозначены параметры равновесной термодинамики.

рованием с учетом неравновесности и равновесности процессов, сопоставлены между собой. Установлена необходимость учета кинетики рабочих процессов и реакции азотирования при расчете горения аэрозвеси порошка алюминия при низких коэффициентах избытка воздуха.

Результаты равновесных и неравновесных расчетов приведены в табл. 2. Видно, что при $\alpha = 0.5$ параметры совпадают при времени процесса $\tau \rightarrow \infty$. Это указывает на адекватность описания горения аэрозвеси по представленной математической модели. При низких значениях $\alpha = 0.1 \div 0.3$ без учета реакции азотирования при большом времени горения параметры, рассчитанные по приведенной модели неравновесной термодинамики, стремятся к значениям равновесной термодинамики, определенным по программе «Астра». Если же реакцию азотирования при этих α учесть в расчетах «Астра», результаты будут существенно отличаться от параметров, определенных по

неравновесной термодинамике.

В табл. 3 представлены значения объемной доли газовых компонентов в потоке, вычисленные по программе «Астра», в сравнении с результатами расчетов по вышеописанной модели. По результатам расчетов при высоких значениях коэффициента избытка воздуха ($\alpha = 0.5$) доли газовых компонентов в потоке в конце процесса горения совпадают в случаях с учетом и без учета реакции азотирования. При низких значениях α ($0.1 \leq \alpha \leq 0.3$) в конце процесса горения без учета реакции азотирования неравновесные параметры стремятся к равновесным.

Таким образом, необходимость учета реакции азотирования при $0.1 \leq \alpha \leq 0.3$ обоснована не только данными сравнительного анализа результатов равновесных термодинамических расчетов, как это выполнено в работе [28], но и данными расчетов, учитывающих неравновесную термодинамику процессов.

Кроме того, расчеты показывают, что объемная доля субоксида Al_2O по результатам ис-

Таблица 3

Объемные доли газовых компонентов в потоке

Учет реакции азотирования в расчетах	α	Равновесная модель			Неравновесная модель (при $\tau \rightarrow \infty$)		
		p_{Al}/p	p_{Al_2O}/p	p_{AlO}/p	p_{Al}/p	p_{Al_2O}/p	p_{AlO}/p
Без учета	0.1	0.002	0.010	$\approx 10^{-8}$	0.002	0.016	$\approx 10^{-7}$
	0.2	0.027	0.170	$\approx 10^{-7}$	0.026	0.171	$\approx 10^{-6}$
	0.3	0.033	0.213	$\approx 10^{-6}$	0.032	0.214	$\approx 10^{-6}$
	0.5	0.059	0.162	0.002	0.059	0.161	0.002
С учетом	0.1	0.336	0.480	$\approx 10^{-6}$	—	—	—
	0.2	0.103	0.381	$\approx 10^{-7}$	—	—	—
	0.3	0.061	0.287	$\approx 10^{-6}$	—	—	—
	0.5	0.059	0.162	0.002	—	—	—

следований с учетом как неравновесной, так и равновесной термодинамики многократно превосходит долю паров алюминия при всех значениях α . В то же время объемная доля паров AlO на несколько порядков меньше, чем доля паров металла и субоксида Al₂O. Таким образом, в рассматриваемом диапазоне α обоснована необходимость учета образования субоксида Al₂O, в то время как образование AlO при горении в воздухе можно не учитывать.

Преимущество предложенной математической модели (и разработанного программного обеспечения, соответственно) заключается в том, что в каждый момент времени рассчитывается текущее значение объемных долей газообразных Al, Al₂O и AlO и текущее равновесное значение данных параметров. Появляется возможность сравнивать эти значения и равновесные при реальном времени пребывания реагирующей смеси в камере (менее 10 мс) и таким образом оценивать действительную степень неравновесности соответствующих физико-химических процессов. Такой анализ проведен в работе [29].

На рис. 1 представлены зависимости от времени отношения параметров, рассчитанных по неравновесной модели, к результатам равновесных термодинамических расчетов при низком коэффициенте избытка воздуха α (значения индексов те же, что и в табл. 2).

С течением времени указанные отношения для процесса, термодинамические параметры которого рассчитаны без учета реакции азотирования, сходятся к 1 (рис. 1, а), что свидетель-

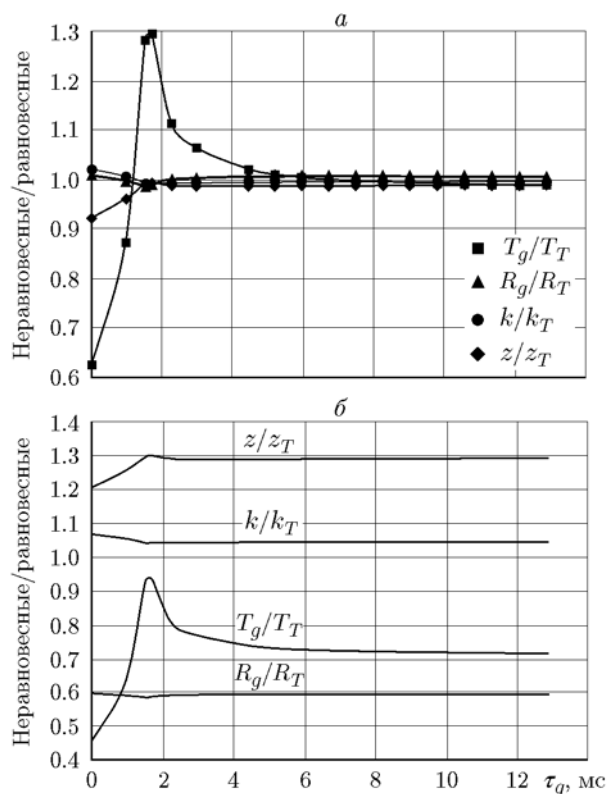


Рис. 1. Зависимость отношения параметров, рассчитанных в неравновесной и равновесной постановках, от времени без учета реакции азотирования (а) и с ее учетом (б) ($p = 0.25$ МПа, $\alpha = 0.1$)

ствует об адекватности термодинамического описания процессов в математической модели. Однако, если в термодинамических расчетах

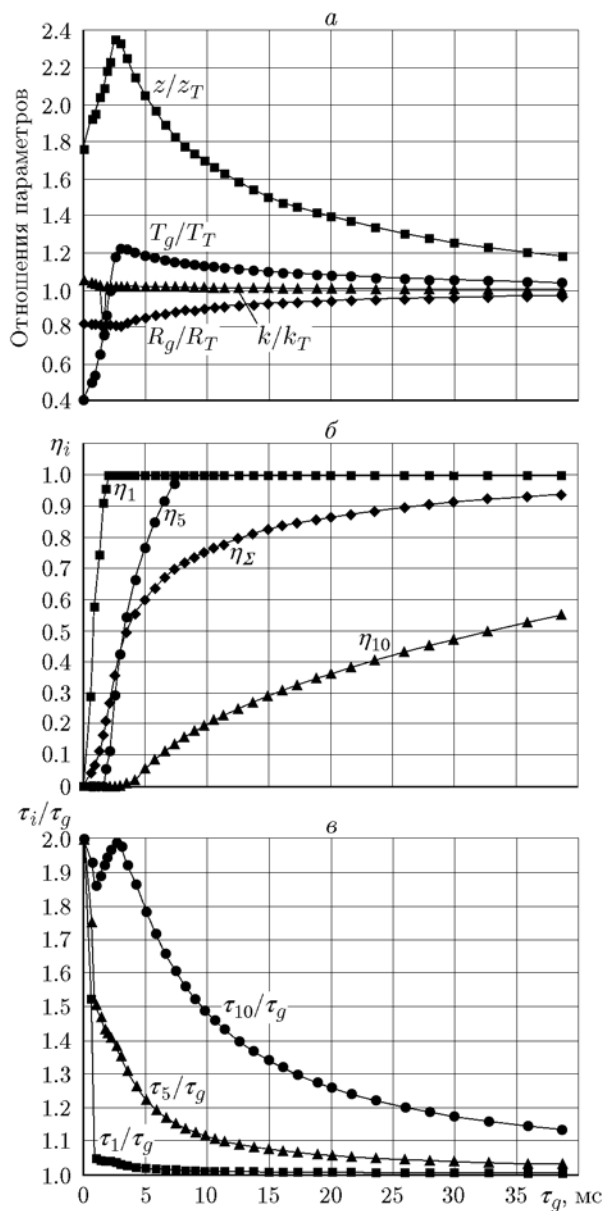


Рис. 2. Зависимость отношения параметров, рассчитанных в неравновесной и равновесной постановках (а), полноты сгорания алюминия (б) и относительного времени нахождения фракций в потоке (в) от времени ($p = 0.25$ МПа, $\alpha = 0.5$):

индекс $i = 1$ соответствует самой мелкой фракции, $i = 5$ — среднему размеру частиц, $i = 10$ — самой крупной фракции размеров

результатов моделирования при низких значениях α с учетом реакции азотирования (которую в таких случаях необходимо принимать в расчет) следует расширить представленную выше математическую модель путем добавления соответствующих объектов, описывающих взаимодействие алюминия с азотом.

На рис. 2 представлены результаты моделирования процесса горения алюминия с более высоким значением α , при котором учет реакции азотирования теряет актуальность [28]. На рис. 2,а представлены зависимости от времени отношений параметров, рассчитанных по неравновесной модели, к результатам равновесных термодинамических расчетов. Обозначения и индексы на рис. 2,а те же, что и в табл. 2. Графики рис. 2,а показывают, что с течением времени указанные отношения сходятся к 1, что подтверждает адекватность описания процессов представленной в настоящей статье математической моделью.

Зависимость полноты сгорания η_i частиц отдельных фракций и суммарной полноты сгорания всех фракций от времени показана на рис. 2,б. Видно, что с течением времени полнота сгорания стремится к 1, причем тем медленнее, чем больше начальный размер частиц металла.

Относительное время нахождения фракций в потоке как функция абсолютного времени τ_g движения газа отражено на рис. 2,в. По данным графикам можно оценить инерционность движения частиц различного размера в потоке газовой фазы. Относительные значения для всех фракций сходятся к 1, однако скорость этой сходимости (как и сходимости на рис. 2,б) существенно отличается для частиц мелких, средних и крупных фракций.

Таким образом, можно сделать вывод, что равновесные значения характеристик процесса горения алюминия для средних и крупных фракций исходных частиц не устанавливаются даже при длительном нахождении в потоке и учет неравновесной термодинамики физико-химических превращений в металловоздушной смеси является необходимым условием построения адекватных моделей ее горения.

ВЫВОДЫ

1. На основании проведенных расчетов обоснована адекватность результатов математического моделирования с применением описанной модели, учитывающей неравновесность

учесть реакцию азотирования, данная сходимость будет нарушена и рассчитанные по модели параметры смеси будут существенно отличаться от термодинамических (рис. 1,б). Таким образом, для получения адекватных ре-

процессов в части описания параметров реагирующей алюминиево-воздушной смеси. При этом анализ динамики процессов горения показывает, что с течением времени устанавливается скоростное равновесие частиц и газовой фазы и полнота сгорания частиц металла стремится к 1.

2. Учет образования промежуточных продуктов реакции (субоксидов) является актуальной задачей. Необходимость такого учета подтверждена сравнением данных термодинамических исследований и расчетов с учетом неравновесности процессов. В частности, в настоящей работе установлено, что при значениях коэффициента избытка воздуха $0.1 \div 0.5$ можно не учитывать образование субоксида AlO , а образование субоксида Al_2O учитывать необходимо, поскольку объемная доля Al_2O многократно превосходит долю паров алюминия.

3. Представленная математическая модель позволяет в каждый момент времени рассчитывать текущее значение объемных долей газообразных Al , Al_2O и AlO и текущее равновесное значение этих параметров, что дает возможность оценивать степень неравновесности процессов образования соответствующих компонентов при сравнении с данными классического термодинамического анализа.

4. Необходимость учета реакции азотирования при горении аэрозвесей алюминия определяется коэффициентом избытка воздуха α . Так, при $\alpha \geq 0.5$ реакцию азотирования можно не учитывать, а при $0.1 \leq \alpha < 0.5$ ее необходимо принимать в расчет. Следовательно, при горении сильно переобогащенных смесей алюминия и воздуха математическую модель, представленную в настоящей работе, следует усовершенствовать путем включения в нее описания взаимодействия металла с азотом.

5. Использование полученных результатов позволит рационально разрабатывать математические модели горения и течения металло-воздушных смесей в прямоточных камерах сгорания при проектировании технологических и энергетических установок на порошкообразном алюминиевом горючем.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Малинин В. И., Коломин Е. И., Антипин И. С.** Воспламенение и горение аэрозвеси алюминия в реакторе высокотемпературного синтеза порошкообразного оксида алюминия // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 5. — С. 41–51.
2. **Прямоточный** воздушно-реактивный двигатель на порошкообразном металлическом горючем: пат. РФ № 2439358 С2 / Малинин В. И., Виноградов С. М., Иванов О. М., Гуреев В. В., Марченко А. И. — Оpubл. 10.01.2012, Бюл. № 1.
3. **Способ** получения нанодисперсных порошков и устройство для его осуществления: пат. РФ № 2462332 С2 / Малинин В. И., Егоров А. Г., Сафронов А. И., Иванов С. В., Тизилев А. С. — Оpubл. 27.09.2012, Бюл. № 27.
4. **Способ** получения нанодисперсных порошков и устройство для его реализации: пат. РФ № 2533580 С2 / Малинин В. И., Шатров А. В., Русинов Г. В., Федоровцев П. И., Земерев Е. С., Болховских Д. А. — Оpubл. 20.11.2014, Бюл. № 31.
5. **Крюков А. Ю.** Адаптация внутрикамерных процессов и элементов конструкции энергоустановок на порошковом горючем к технологиям получения ультра- и нанодисперсных материалов // Изв. Самар. науч. центра РАН. Спец. вып.: Актуальные вопросы тепло- и массообмена, энергоэффективность, исследование вихревых закрученных потоков. — 2008. — С. 29–38.
6. **Ягодников Д. А.** Воспламенение и горение порошкообразных металлов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009.
7. **Егоров А. Г.** Процессы горения порошкообразного алюминия в прямоточных камерах реактивных двигательных установок. — Самара: Изд-во Самар. науч. центра РАН, 2004.
8. **Бербек А. М., Малинин В. И.** Проект ракетного двигателя, работающего на порошкообразном металлическом горючем и воде в качестве окислителя // Космонавтика и ракетостроение. — 2010. — № 1 (58). — С. 146–152.
9. **Демидов С. С., Малинин В. И., Бульбович Р. В.** Ракетный двигатель на порошкообразном алюминиевом горючем и углекислом газе в качестве окислителя // Вестн. Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. Аэрокосм. техника. — 2014. — № 36. — С. 119–130.
10. **Золотко А. Н., Полетаев Н. И., Вовчук Я. И.** Газодисперсный синтез наночастиц оксидов металлов // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 125–143.
11. **Foot J. P., Litchford R. J.** Powdered magnesium-carbon dioxide rocket combustion technology for in situ mars propulsion // Special Report, NASA/TP-2007-215077. — Marshall Space Flight Center, Alabama, 2007.
12. **Shafirovich E., Varma A.** Technology requirements for mars sample return using CO_2 /metal powder propellants // J. Propul. Power. — 2008. — V. 24, N 3. — P. 385–394.
13. **Бабук В. А., Васильев В. А., Романов О. Я., Марьяш В. И., Толмачев Г. А.**

- Физико-химические превращения капель Al—Al₂O₃ в активном газовом потоке // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 3. — С. 129–133.
14. Бекстед М. В., Лианг У., Паддупаккам К. В. Математическое моделирование горения одиночной алюминиевой частицы (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 6. — С. 15–33.
 15. Гремячкин В. М. К теории воспламенения металлических частиц // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 3. — С. 9–14.
 16. Малинин В. И., Коломин Е. И., Антипин И. С. Модель горения высокоскоростного потока взорвеси частиц алюминия, учитывающая кинетику процессов и особенности накопления окисла // Хим. физика. — 1998. — Т. 17, № 10. — С. 80–92.
 17. Малинин В. И., Коломин Е. И., Антипин И. С., Рылов В. Л. Математическое моделирование воспламенения и горения частиц алюминия за ударными волнами, учитывающее кинетику процессов и особенности накопления окисла // Хим. физика. — 2001. — Т. 20, № 6. — С. 75–83.
 18. Малинин В. И. Внутрикамерные процессы в установках на порошкообразных металлических горючих. — Екатеринбург; Пермь: УрО РАН, 2006.
 19. Троицкий И. А., Железнов В. А. Металлургия алюминия. — М.: Metallurgy, 1977.
 20. Физико-химические свойства окислов: справ. изд. / под ред. Г. В. Самсонова. — М.: Metallurgy, 1978.
 21. Горение порошкообразных металлов в активных средах / П. Ф. Похил, А. Ф. Беляев, Ю. В. Фролов и др. — М.: Наука, 1972.
 22. Малинин В. И., Коломин Е. И., Антипин И. С. Особенности горения частицы алюминия в потоке активных газов // Физика горения и взрыва. — 1999. — Т. 35, № 1. — С. 41–48.
 23. Гуревич М. А., Лапкина К. И., Озеров Е. С. Предельные условия воспламенения частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 2. — С. 172–176.
 24. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / под ред. В. П. Глушко. — М.: Наука, 1981. — Т. 3, кн. 2.
 25. Кэй Дж., Лэби Т. Таблицы физических и химических постоянных. — М.: Физматгиз, 1962.
 26. Физические величины: справочник / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др.; под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991.
 27. Трусов Б. Г. Моделирование химических и фазовых равновесий при высоких температурах. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 1991.
 28. Ягодников Д. А., Сухов А. В., Малинин В. И., Кирьянов И. М. Роль реакции азотирования в распространении пламени по переобогащенным металловоздушным смесям // Вестн. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Машиностроение. — 1990. — № 1. — С. 121–124.
 29. Крюков А. Ю., Малинин В. И. Расчет содержания субоксидов в продуктах сгорания алюминиево-воздушной смеси по модели неравновесной термодинамики // Вестн. Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. Аэрокосм. техника. — 2016. — № 44. — С. 116–131.

*Поступила в редакцию 5/X 2016 г.,
в окончательном варианте — 1/II 2017 г.*