

# ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ОБЛАКА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В КОНТИНУАЛЬНОМ РЕЖИМЕ. I. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ТЕЧЕНИЕ

Ю. А. Гостеев, А. В. Федоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

Предложена математическая модель для описания движения смеси газа и реагирующих металлических частиц в двухскоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред. В качестве приложения данной модели развита теория волны воспламенения в смеси газа и частиц магния, обобщающая теорию теплового взрыва Н. Н. Семенова на случай движущегося облака частиц. Дана классификация типов течения смеси за фронтом ударной волны. Расчетный период индукции облака коррелирует с данными эксперимента. Продемонстрированы устойчивое распространение по смеси стационарной волны воспламенения и возможность ее иницирования.

## 1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим единичный объем смеси, заполненный газом и твердыми частицами металла, покрытыми оксидной пленкой. Ограничимся плоским одномерным случаем, когда все параметры газовой смеси зависят от пространственной координаты и времени. Считаем, что в смеси присутствуют следующие компоненты: газовая фаза — окислитель (индекс 11), инертный газ (12) и газообразные продукты окисления металла (13); дисперсная фаза — металл (22), вступающий с окислителем в гетерогенную химическую реакцию, и конденсированный продукт этой реакции в виде оксидной пленки (23). Для средних параметров фаз запишем уравнения сохранения [1, 2]:

массы

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial x} &= \bar{\nu}_2 J, \\ \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial x} &= -\bar{\nu}_2 J, \end{aligned} \quad (1.1)$$

импульса

$$\frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 u_1^2 + m_1 p)}{\partial x} = p \frac{\partial m_1}{\partial x} + \bar{\nu}_2 J u_2 + R_1, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2^2 + m_2 p)}{\partial x} = p \frac{\partial m_2}{\partial x} - \bar{\nu}_2 J u_2 + R_2,$$

энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 u_1 E_1 + m_1 u_1 p)}{\partial x} &= -p \frac{\partial m_1}{\partial t} + \\ + \bar{\nu}_2 J \left[ -\chi_1 + h_1 + \frac{u_1^2}{2} \right] &+ Q_1 + R_1 (\beta u_1 + \bar{\beta} u_2), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2 E_2 + m_2 u_2 p)}{\partial x} = -p \frac{\partial m_2}{\partial t} + \quad (1.3)$$

$$+ \bar{\nu}_2 J \left[ -\chi_2 - h_2 - \frac{u_2^2}{2} \right] + Q_2 + R_2 (\beta u_1 + \bar{\beta} u_2).$$

Здесь  $\rho_i$ ,  $u_i$ ,  $E_i$ ,  $h_i$ ,  $m_i$  — средняя плотность, скорость, полная энергия, энтальпия и объемная концентрация  $i$ -й фазы;  $p$  — давление смеси;  $R_i$ ,  $Q_i$  — члены, задающие силовое и тепловое взаимодействие фаз. Остальные обозначения пояснены ниже.

Уравнения кинетики для газовой фазы следующие:

$$\rho_1 \frac{d_1 \xi_{11}}{dt} = -(\nu_{11} + \bar{\nu}_2 \xi_{11}) J,$$

$$\frac{\nu_{11} + \bar{\nu}_2 \xi_{11}}{\nu_{11} + \nu_2 \xi_{11,0}} = \frac{\xi_{12}}{\xi_{12,0}}, \quad \xi_{11} + \xi_{12} + \xi_{13} = 1,$$

где  $\xi_{1j} = \rho_{1j} / \rho_1$  — массовая доля  $j$ -го компонента газовой фазы.

Уравнения кинетики для дисперсной фазы запишем в виде интегралов

$$\frac{\xi_{22}(\alpha_\nu - \xi_{22,0})}{\xi_{22,0}(\alpha_\nu - \xi_{22})} = \left( \frac{r}{r_0} \right)^3, \quad \xi_{22} + \xi_{23} = 1,$$

где  $\xi_{2j} = \rho_{2j} / \rho_2$ ,  $\alpha_\nu = \nu_{22} / \bar{\nu}_2$ ,  $\bar{\nu}_2 = \nu_{22} - \nu_{23}$ . Здесь  $\nu_{ij}$  — стехиометрические коэффициенты реакции окисления, удовлетворяющие соотношению

$$\nu_{11} + \nu_{22} = \nu_{13} + \nu_{23};$$

$r$  — радиус металлического ядра частицы, связанный с полным радиусом частицы  $R = r + h$

(где  $h$  — толщина оксидной пленки) посредством интеграла

$$R^3 - R_0^3 = a(r^3 - r_0^3),$$

где  $a = 1 - \nu_{23}\rho_{22}^0/\bar{\nu}_2\rho_{23}^0$ . Для источникового члена  $J$  справедливо выражение

$$J = -\frac{3\rho_{22}}{r\nu_{22}}\frac{d_2r}{dt}.$$

В качестве замыкающих соотношений используем:

калорическое уравнение состояния в виде

$$p = \mathcal{R}T_1\rho_1^0,$$

где

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\xi_{1i}}{\mu_i} = \sum_{i=1}^3 \xi_{1i}\mathcal{R}_{1i},$$

$\mathcal{R}_\mu$  — универсальная газовая постоянная,

$$\rho_1^0 = \rho_1/m_1, \quad m_1 + m_2 = 1, \quad m_2 = 4/3\pi R^3 n;$$

термические уравнения состояния для внутренних энергий фаз

$$e_1 = \sum_{i=1}^3 \xi_{1i}e_{1i}, \quad e_{1i} = c_{v,1i}(T_1 - T_0) + e_{1i}^0,$$

$$e_2 = \sum_{j=2}^3 \xi_{2j}e_{2j}, \quad e_{2j} = c_{v,2j}(T_2 - T_0) + e_{2j}^0;$$

связи между энтальпиями и внутренними энергиями в виде

$$h_{1i} = e_{1i} + \frac{p_{1i}}{\rho_{1i}} = c_{p,1i}(T_1 - T_0) + h_{1i}^0,$$

$$h_{1i}^0 = e_{1i}^0 + \mathcal{R}_{1i}T_0, \quad i = 1, 2, 3;$$

условие несжимаемости частиц

$$\rho_{2j}^0 = \text{const}, \quad j = 2, 3.$$

Здесь  $c_{p,1i}$  — теплоемкость  $i$ -го компонента газовой фазы при постоянном давлении,  $c_{v,1i}$  — при постоянном объеме;  $c_{v,2j} = c_{p,2j}$  — теплоемкость  $j$ -го компонента дисперсной фазы.

В уравнениях (1.2), (1.3) на функции  $R_i$ ,  $Q_i$  налагаются условия  $R_1 = -R_2$ ,  $Q_1 = -Q_2$  (см. также ниже); для полной энергии фазы справедливо выражение  $E_i = e_i + u_i^2/2$ , где  $e_i$  — внутренняя энергия. Величина  $\beta$  задает долю тепла, выделяемого в дисперсной фазе за счет работы силы трения,  $\beta = 1 - \beta$  — аналогичная величина для газовой фазы. Параметры  $\chi_1, \chi_2$  являются аккомодационными коэффициентами и позволяют распределять тепло химической реакции между фазами. Значения  $\chi_i$  находятся из условия сохранения полной энергии смеси:

$$\chi_1 + \chi_2 = h_1 - h_2.$$

Тепло химической реакции есть, по определению,

$$q_* = \nu_{11}h_{11} + \nu_{22}h_{22} - \nu_{13}h_{13} - \nu_{23}h_{23},$$

причем в газ идет  $\alpha_q q_*$ , в частицы  $(1 - \alpha_q)q_*$ , где  $\alpha_q$  — доля тепла химической реакции, поступающего в газ. Тогда нетрудно получить следующие выражения:

$$\chi_1 = [-\alpha_q q_* + (\nu_{11} + \bar{\nu}_2 \xi_{11})h_{11} + \bar{\nu}_2 \xi_{12}h_{12} - (\nu_{13} - \bar{\nu}_2 \xi_{13})h_{13}]/\bar{\nu}_2,$$

$$\chi_2 = h_1 - h_2 - \chi_1.$$

В отличие от [1] в данной математической модели проведено распределение тепла химической реакции между фазами в соответствии с величиной  $\alpha_q$ . Кроме того, здесь не предполагается, что полный радиус частицы сохраняется постоянным, что важно при протекании в среде медленных процессов окисления.

В соответствие с [3] проведем термодинамический анализ предложенной математической модели. Для этой цели введем удельную энтропию смеси согласно соотношению

$$\rho S = \rho_1 S_1 + \rho_2 S_2,$$

где  $S_1, S_2$  — удельные энтропии фаз. Это позволяет найти субстанциональную производную от  $S$ , которая характеризует изменение энтропии в постоянном по массе объеме двухфазной среды:

$$\rho \frac{DS}{Dt} = \rho_1 \frac{d_1 S_1}{dt} + \rho_2 \frac{d_2 S_2}{dt} - \bar{\nu}_2 J(S_2 - S_1).$$

Здесь учтены уравнения сохранения масс (1.1) для каждой из фаз. Далее, в предположении локального термодинамического равновесия в пределах каждой фазы можно использовать соотношения Гиббса

$$\rho_i T_i \frac{d_i S_i}{dt} = \rho_i \frac{d_i e_i}{dt} - \frac{m_i p}{\rho_i^0} \frac{d_i \rho_i^0}{dt}, \quad i = 1, 2,$$

правые части которых могут быть определены с помощью уравнений притока тепла фаз:

$$\rho_1 \frac{d_1 e_1}{dt} - \frac{m_1 p}{\rho_1^0} \frac{d_1 \rho_1^0}{dt} = R_1 \beta (u_2 - u_1) + \nu_2 J \left[ -\chi_1 + \frac{(u_2 - u_1)^2}{2} \right] + Q_1,$$

$$\rho_2 \frac{d_2 e_2}{dt} - \frac{m_2 p}{\rho_2^0} \frac{d_2 \rho_2^0}{dt} = R_1 \beta (u_2 - u_1) - \\ - \nu_2 J \chi_2 + Q_1.$$

В итоге для изменения энтропии смеси находим

$$\rho \frac{DS}{Dt} = \left( \frac{\bar{\beta}}{T_1} + \frac{\beta}{T_2} \right) R_1 (u_2 - u_1) + Q_1 \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) - \\ - \bar{\nu}_2 J \left[ -S_2 + S_1 + \frac{\chi_1}{T_1} + \frac{\chi_2}{T_2} - \frac{(u_2 - u_1)^2}{2T_1} \right] = \\ = \rho \frac{D^{(i)}S}{Dt} + \rho \frac{D^{(e)}S}{Dt},$$

где  $\rho D^{(e)}S/Dt = 0$  из-за пренебрежения потоками импульса и тепла, связанными с диссипативными процессами в газовой фазе (вязкость и теплопроводность),  $\rho D^{(i)}S/Dt = \sigma$ ,  $\sigma = j_R X_R + j_Q X_Q + j_{12} X_{12}$  — диссипативная функция. Для термодинамических сил и потоков, входящих в  $\sigma$ , имеем следующие выражения:

$$X_R = (u_2 - u_1) \left( \frac{\bar{\beta}}{T_1} + \frac{\beta}{T_2} \right), \quad j_R = R_1; \\ X_Q = \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}, \quad j_Q = Q_1; \\ X_{12} = -S_1 + S_2 + \frac{\chi_1}{T_1} + \frac{\chi_2}{T_2} - \frac{(u_2 - u_1)^2}{2T_1}, \\ j_{12} = -\bar{\nu}_2 J.$$

Для установления связей между потоками и силами используются, например, соотношения типа линейных соотношений Онзагера, когда силовое и тепловое взаимодействия между фазами описываются в виде

$$R_1 \sim (u_2 - u_1), \quad Q_1 \sim (T_2 - T_1).$$

## 2. НЕСТАЦИОНАРНАЯ МОДЕЛЬ ВОЛНЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

Рассмотрим приложение данной математической модели к задаче о распространении волны воспламенения по газозвеси металлических частиц. Пусть имеется одномерное пространство, заполненное смесью газа и частиц магния. При воздействии на облако ударной волны (УВ) в смеси возможна реализация условий, при которых происходит воспламенение частиц. Это явление ранее исследовалось в

рамках численного эксперимента в [1, 4, 5], лабораторные физические эксперименты были проведены в [6] для газозвеси частиц магния в кислороде. В [4, 5] расчетным путем получены данные относительно зависимости времени задержки воспламенения смеси от числа Маха УВ, однако не были определены аналитические критерии воспламенения облака. Не анализировались проблемы инициирования волны воспламенения в смеси.

Ниже представлено теоретическое исследование волны воспламенения в движущейся за фронтом УВ смеси газа и реагирующих частиц магния, которое дополняет работы [1, 4, 5] в указанном выше смысле.

Построение теории воспламенения облака частиц начнем с асимптотического односкоростного варианта течения газозвеси. Считаем, что частицы достаточно мелкие и можно пренебречь различием скоростей фаз. Поэтому для описания движения смеси привлечем данную выше общую математическую модель в односкоростном приближении механики гетерогенных сред в виде законов сохранения массы, импульса и энергии для смеси в целом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + P)u}{\partial x} = 0. \quad (2.1)$$

Уравнение притока тепла для дисперсной фазы запишем в недивергентной форме:

$$\rho \left( \frac{\partial T_2}{\partial t} + u \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = G(T_1, T_2), \quad (2.2)$$

добавим замыкающие соотношения в виде термического и калорического уравнений состояния:

$$E = e + \frac{u^2}{2}, \quad e = \bar{c}_{v,1} T_1 + \bar{c}_{v,2} T_2 + Q, \\ P = \rho T_1. \quad (2.3)$$

Здесь все величины известным образом соотносятся с парциальными параметрами фаз и обезразмерены по начальному состоянию перед фронтом УВ. Для масштабов плотности, давления и температуры выбраны  $\rho_M = \rho_0$ ,  $p_M = p_0$ ,  $T_M = T_0$ . Введены характерные скорость  $u_M = \sqrt{p_M/\rho_M}$ , энергия  $e_M = u_M^2$ , время  $t_M$ , длина  $x_M = u_M t_M$ . Функция  $G(T_1, T_2)$  определяет подвод тепла химической реакции окисления магниевых частиц в стадии воспламенения и межфазный теплообмен:

$$G(T_1, T_2) = B_2(T_m - T_2) \exp\left(-\frac{E_a}{T_2}\right) - A_2(T_2 - T_1),$$

где

$$A_2 = \frac{3m_2 \text{Nu}_{12} \lambda_1 t_M}{2\xi_2 \rho_M c_{v,2} r^2}, \quad B_2 = \frac{3\xi_{11} \rho_{22} q t_M K_{00}}{\xi_2 \rho_M c_{v,2} r},$$

$$K_{00} = \frac{K_0}{1-a}, \quad q = \frac{q_*}{\nu_{22}}, \quad E_a = \frac{E_A}{\mathcal{R}_\mu T_0};$$

$K_0$ ,  $q_*$  и  $E_A$  — соответственно предэкспонент, тепловой эффект и энергия активации реакции окисления; множитель  $T_m - T_2$  введен в работе [7];  $\xi_2 = \rho_2/\rho$  — массовая концентрация дисперсной фазы;  $\rho_{22}$  — средняя плотность компонента металла;  $\text{Nu}_{12}$  — число Нуссельта межфазного теплообмена;  $\lambda_1$  — теплопроводность газовой фазы (см. также [2]). Введены константы

$$\bar{c}_{v,1} = \frac{1}{\gamma_1 - 1}, \quad \bar{c}_{v,2} = \frac{\xi_2 c_{v,2}}{\xi_1 c_{v,1}} \bar{c}_{v,1}, \quad Q = \frac{Q_0}{e_M},$$

где  $Q_0 = \xi_2 Q - (\xi_1 c_{v,1} + \xi_2 c_{v,2}) T_0 + e_{11}^0$ . Для простоты изложения полагаем, что все тепло реакции окисления выделяется в дисперсной фазе ( $\alpha_q = 0$ ). Относительно величины тепловыделения приведем следующее

**УТВЕРЖДЕНИЕ 1.** Пусть для физико-химических и теплофизических параметров смеси выполнены условия

$$e_{11}^0 = e_{12}^0 = e_{13}^0, \quad e_{22}^0 = e_{23}^0,$$

$$\nu_{11} c_{p,11} = \nu_{13} c_{p,13}, \quad \nu_{22} c_{p,22} = \nu_{23} c_{p,23}.$$

Тогда тепловыделение от химической реакции определяется в виде

$$q_* = \nu_2 Q - (\nu_{13} c_{v,13} - \nu_{11} c_{v,11}) T_0 = \text{const},$$

$$Q = e_{22}^0 - e_{11}^0 = \text{const},$$

т. е. в этом частном случае  $q_*$  — постоянная величина, не зависящая от температур фаз.

Покажем, что система уравнений (2.1)–(2.3) вместе с соответствующими начальными и граничными условиями допускает решение типа бегущей волны воспламенения.

### 3. АДИАБАТИЧЕСКАЯ СТАЦИОНАРНАЯ ВОЛНА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСИ

3.1. Основные уравнения и постановка задачи. Свяжем систему координат с фронтом УВ и с учетом этого запишем стационарный вариант уравнений (2.1), (2.2):

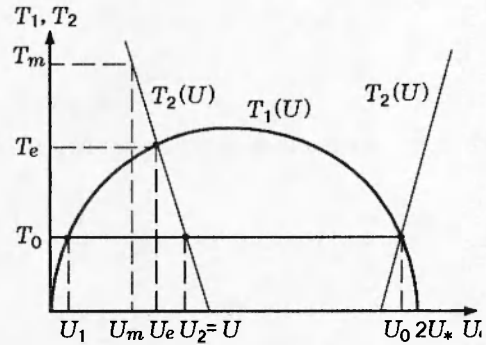


Рис. 1. Качественный вид зависимостей температур фаз от скорости смеси (соотношения (3.4))

$$\begin{aligned} \rho U &= C_1, & C_1 U + P &= C_2, \\ e + \frac{U^2}{2} + \frac{P}{\rho} &= C_3, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\frac{dT_2}{d\zeta} = B \left\{ (T_m - T_2) \exp\left(-\frac{E_a}{T_2}\right) - \alpha(T_2 - T_1) \right\}. \quad (3.2)$$

Здесь  $\zeta = x - Dt$  — автомодельная координата;  $D$  — скорость ударной волны;  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$  — потоки массы, импульса и полной энергии смеси в начальном состоянии;  $\alpha = A_2/B_2$ ;  $B = B_2/C_1$ . В качестве начальных данных примем для смеси условия:

перед фронтом замороженной УВ

$$\Phi = \Phi_0 \quad \text{при} \quad \zeta \rightarrow -\infty, \quad (3.3a)$$

за фронтом

$$\Phi = \tilde{\Phi} \quad \text{при} \quad \zeta = 0, \quad (3.3b)$$

стационарности на  $+\infty$

$$\frac{d\Phi}{d\zeta} \rightarrow 0, \quad \text{при} \quad \zeta \rightarrow +\infty. \quad (3.3b)$$

Здесь  $\Phi$  — вектор решения,  $\Phi = (\rho, U, P, T_1, T_2)$ .

Таким образом, задача об определении бегущей волны воспламенения смеси свелась к решению краевой задачи (3.1)–(3.3) в области  $(-\infty, +\infty)$ . Отметим, что система уравнений (3.1), (3.2) может быть сведена к одному дифференциальному уравнению для температуры  $T_2$  или скорости  $U$ .

3.2. Классификация режимов течения смеси. Используя (3.1), можно получить алгебраические выражения температур фаз через скорость смеси:

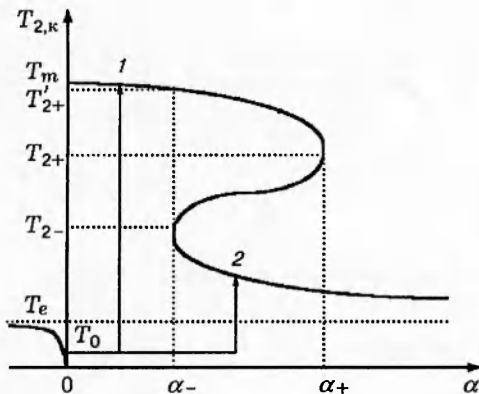


Рис. 2. Характер зависимости конечной равновесной температуры дисперсной фазы от параметра  $\alpha$ :

линии со стрелками показывают ход нагрева частиц: 1 — при  $\alpha < \alpha_-$ , 2 — при  $\alpha > \alpha_+$

$$T_1(U) = U(2U_* - U), \quad T_2(U) = a_2 U^2 - a_1 U + a_0, \quad (3.4)$$

$$U_* = \frac{C_2}{2C_1}, \quad a_0 = \frac{C_3 - \bar{Q}}{\bar{c}_{v,2}}$$

$$a_1 = 2U_* \frac{c_{v,1} + 1}{\bar{c}_{v,2}}, \quad a_2 = \frac{c_{v,1} - 0,5}{\bar{c}_{v,2}}$$

Полезно ввести скорость смеси  $U_e$  при равновесии температур,  $T_1(U_e) = T_2(U_e) = T_e$ , а также скорости  $U_1, U_2$  и  $U_m$ , определяемые из условий  $T_1(U_1) = T_0, T_2(U_2) = T_0$  и  $T_2(U_m) = T_m$ . Нетрудно установить, что  $U_2$  совпадает с  $\bar{U}$ , т. е. со скоростью смеси за фронтом УВ. В дальнейшем полагаем, что  $U_m < U_e$  (или  $T_m > T_e$ ). Соотношения (3.4) позволяют провести исследование представлений параметров течения смеси как функций ее скорости.

Это необходимо для анализа конечных равновесных состояний системы (рис. 1). Выдвинем естественное требование: конечные температуры фаз  $T_{1,k}, T_{2,k}$  не могут быть меньше температуры начального состояния  $T_0$ . Это позволяет заключить, что скорость смеси в конечном состоянии  $U_k$  будет находиться в интервале от  $U_1$  до  $U_2$ . Чтобы определить, будет ли  $U_k$  меньше или больше  $U_e$ , построим бифуркационную диаграмму для состояний равновесия уравнения (3.2) (рис. 2). Зависимость  $T_{2,k} = T_{2,k}(\alpha)$  имеет известный вид [7]. Отличие заключается в том, что роль температуры внешнего воздействия теперь играет величина  $T_e$ . При  $T_{2,k} < T_e$  (что соответствует значениям скорости смеси из интервала  $(U_e, U_2)$  на рис. 1) тепловое равновесие невозможно — становится нефизическим (отрицательным) параметр теплообмена  $\alpha$ . Поэтому из того, что  $T_{2,k}$  не может превысить  $T_m$ , делаем вывод о том, что конечная скорость смеси  $U_k$  будет принадлежать интервалу  $(U_m, U_e)$ . Причем конечная температура дисперсной фазы всегда превышает конечную температуру газовой фазы,  $T_{2,k} > T_{1,k}$ . Относительно величины  $T_{2,k}$  с помощью анализа многообразия катастроф/воспламенения, изображенного в виде сечений  $T_e = \text{const}$  на рис. 2, устанавливается

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Если при течении смеси в волне воспламенения бифуркационный параметр  $\alpha$  меньше  $\alpha_-$ , то конечная температура частиц  $T_{2,k}$  лежит между  $T_{2+}$  и  $T_m$ . Если же  $\alpha > \alpha_-$ , то конечная температура  $T_{2,k}$  находится между  $T_e$  и  $T_{2-}$ . Первый случай ( $\alpha < \alpha_-$ ) соответствует течению смеси за УВ с воспламенением дисперсной фазы (ход нагрева частиц показывает линия 1 на рис. 2), второй ( $\alpha > \alpha_-$ ) — течению с «регулярным» нагревом частиц (линия 2). Здесь  $\alpha_{\pm}$  однозначно определяются через параметры начального состояния смеси.

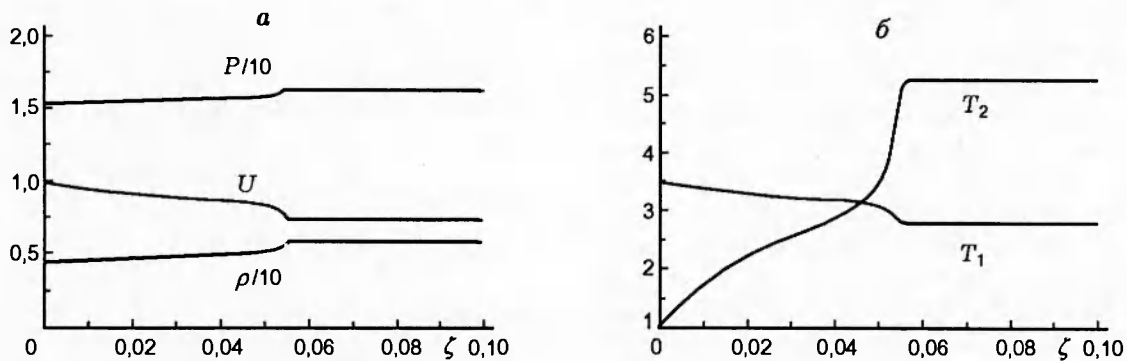


Рис. 3. Стационарная структура волны воспламенения при  $\alpha = 0,276 \cdot 10^{-4} < \alpha_- = 1,58 \cdot 10^{-4}$ ,  $M_{f0} = 3,63$

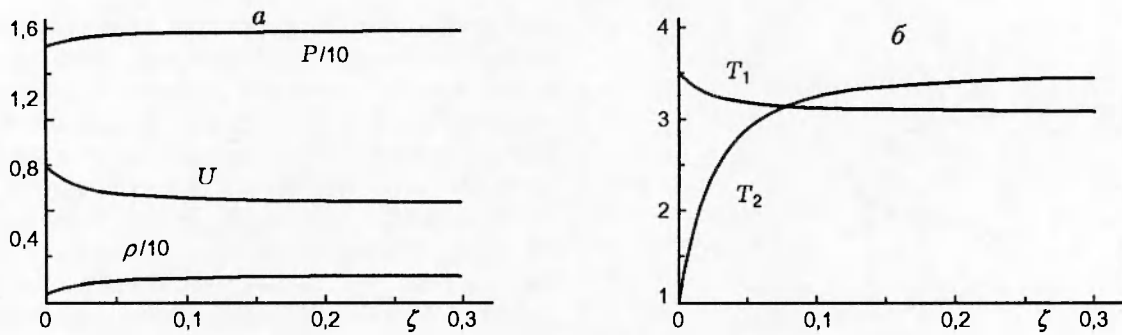


Рис. 4. Стационарная структура течения за УВ при регулярном нагреве частиц при  $\alpha_- = 1,58 \cdot 10^{-4} < \alpha = 2,76 \cdot 10^{-4}$ ,  $M_{f0} = 3,63$

3.3. Численные примеры. В расчетах приняты следующие значения параметров:  $\rho_0 = 1,2 \text{ кг/м}^3$ ;  $p_0 = 10^5 \text{ Па}$ ;  $\rho_{20} = 0,17 \text{ кг/м}^3$ ;  $r = 5 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ ;  $t_M = 10^{-3} \text{ с}$ ;  $Q = 4 \cdot 10^7 \text{ Дж/кг}$ ;  $E_A/\mathcal{R}_\mu = 10^4 \text{ К}$ ;  $K_0 = 10^{-5} \div 10^{-4} \text{ м/(с}\cdot\text{К)}$ .

Обратимся к численным иллюстрациям стационарных структур течения газозвеси за УВ. Так, на рис. 3 приведено распределение параметров смеси за фронтом УВ для течения с воспламенением дисперсной фазы при числе Маха  $M_{f0} = 3,63$ ,  $\alpha \cdot 10^4 = 0,276 < \alpha_- \cdot 10^4 = 1,58$ . В процессе движения смеси происходит нагрев частиц и их воспламенение за счет отбора энергии из газовой фазы. Поэтому профили температуры  $T_1$  и скорости  $U$  монотонно убывающие. Температура частиц  $T_2$  монотонно возрастает, имеет две точки перегиба, последнюю из которых в соответствии с классическими представлениями, справедливыми и для случая движущейся среды, будем связывать с воспламенением:

$$\left. \frac{dT_2}{d\zeta} \right|_{\zeta=\zeta_{ign}} \rightarrow \max, \quad \left. \frac{d^2T_2}{d\zeta^2} \right|_{\zeta=\zeta_{ign}} = 0.$$

В данном варианте координата воспламенения  $\zeta_{ign} \approx 0,055$ , так что время задержки воспламенения  $t_{ign} \approx 100 \text{ мкс}$ , что совпадает по порядку величины с данными эксперимента [6]. Видно, что температуры фаз существенно отличаются во всей зоне течения, хотя имеется точка равновесия температур  $T_1 = T_2 = T_e$ . Однако эта точка неустойчива в силу наличия химического источника тепла. Тепловыделение от реагирующих частиц не успевает повысить температуру газа до воспламенения, так как характерное время конвективного межфазного теплообмена много больше характерного «химического» времени ( $\alpha^{-1} \gg 1$ ).

Рис. 4 иллюстрирует распределение пара-

метров смеси в случае течения с «регулярным» нагревом дисперсной фазы при  $M_{f0} = 3,63$ ,  $\alpha_- \cdot 10^4 = 1,58 < \alpha \cdot 10^4 = 2,76$ . Здесь в области за УВ также имеется температурная неравномерность фаз. Однако профили параметров более гладкие, чем в предыдущем случае. В частности, отсутствует резкое изменение температуры частиц, соответствующее воспламенению дисперсной фазы. Особенность структуры течения состоит в том, что давление и другие параметры смеси достигают равновесных значений раньше, чем температура частиц.

#### 4. УСТОЙЧИВОСТЬ И ИНИЦИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОЙ ВОЛНЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

Представляет значительный интерес задача об иницировании и исследовании устойчивого распространения стационарной структуры волны воспламенения в рамках нестационарного приближения механики гетерогенных сред.

4.1. Устойчивость волны воспламенения. Исследование устойчивости проводили путем численного моделирования начально-краевой задачи для нестационарных уравнений (2.1)–(2.2) со стационарным решением типа бегущей волны в качестве начальных данных. Постановка задачи такова:

Найти вектор решения  $\Phi = (\rho, u, P, T_1, T_2)$ , удовлетворяющий в области  $\{(x, t) : x \in (-\infty, \infty), t \geq 0\}$  системе уравнений (2.1)–(2.3), начальным

$$\Phi = \begin{cases} \bar{\Phi}_0, & x < 0, \\ \Phi_{st}(x), & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{при } t = 0$$

и граничным условиям

$$\Phi = \Phi_0 \quad \text{при } x \rightarrow -\infty,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} \rightarrow 0 \quad \text{при } x \rightarrow +\infty.$$

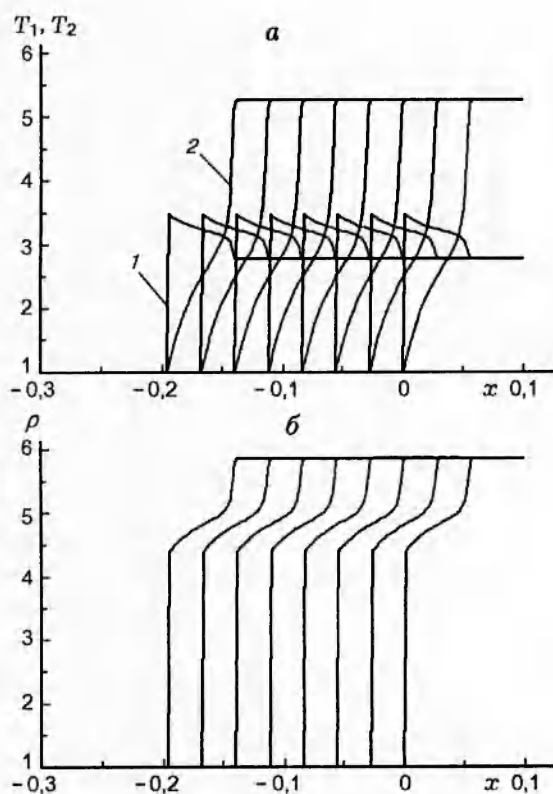


Рис. 5. Распространение стационарной структуры волны воспламенения:  
 а — температура газовой (1) и дисперсной (2) фаз; б — плотность смеси

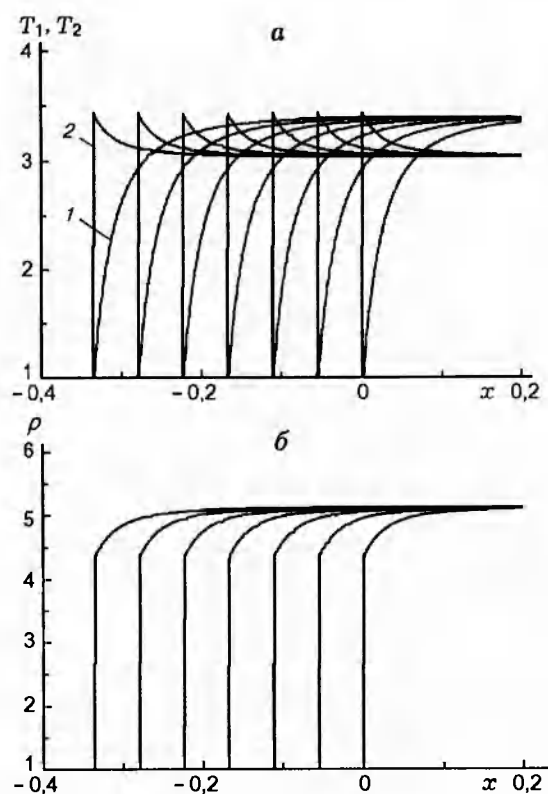


Рис. 6. Распространение стационарной структуры течения смеси при регулярном нагреве дисперсной фазы:  
 а — температура газовой (1) и дисперсной (2) фаз; б — плотность смеси

Здесь  $\Phi_{st}(x)$  — стационарное распределение параметров в бегущей волне воспламенения.

Для решения системы уравнений неравновесной газовой динамики (2.1) использовали конечно-разностную TVD-схему [8]. Уравнение кинетики воспламенения (2.2) интегрировали вдоль траектории методом [9]. Предварительно алгоритм TVD-схемы протестирован на задаче о распаде разрыва в идеальном газе, а также на задаче о распространении замороженной УВ в газозвеси инертных частиц (двухтемпературная модель).

Установлено, что полученные стационарные структуры устойчиво распространяются в течение расчетного периода времени. Так, на рис. 5 приведены параметры волны воспламенения (температуры фаз и плотность смеси) в разные моменты времени с шагом выдачи  $\Delta t = 6,5 \cdot 10^{-3}$  (данные соответствуют рис. 3). Здесь при  $t = 0$  в точке  $x = 0$  расположена лидирующая УВ в структуре стационарной волны

воспламенения. Рис. 6 демонстрирует устойчивость стационарной структуры, описывающей «регулярный» нагрев дисперсной фазы за УВ ( $\Delta t = 6,46 \cdot 10^{-3}$ , данные соответствуют рис. 4). Отметим, что на правой границе области течения поддерживались условия типа дозвукового поршня, гарантирующие стационарность процесса. В экспериментальных исследованиях это обеспечивается квазистационарностью пробки в ударной трубе.

4.2. Инициирование волны воспламенения. В области пространства, занимаемого смесью газа и частиц, в начальный момент времени создается зона повышенных давления и температуры газовой фазы (например, за счет мгновенного локализованного выделения тепла). Необходимо установить, при каких условиях в смеси возникает волна воспламенения. Математически проблема состоит в решении для (2.1), (2.2) задачи о распаде произвольного разрыва.

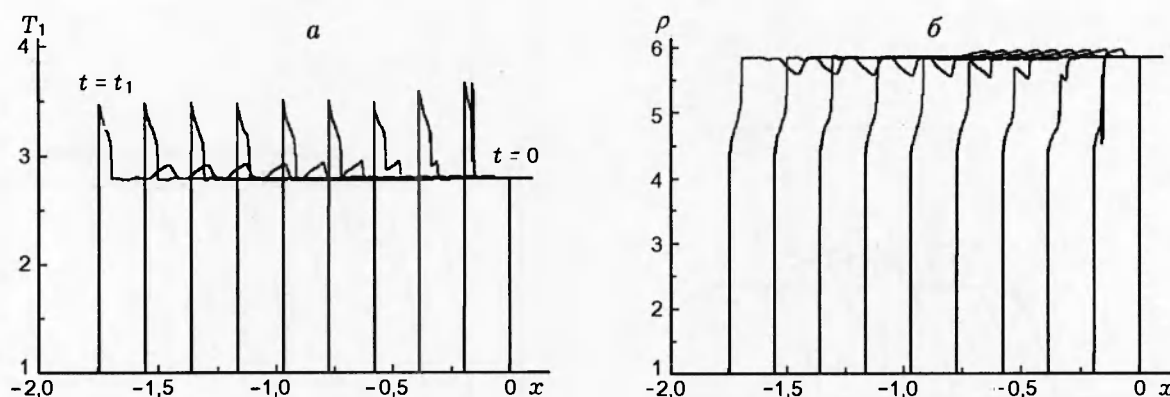


Рис. 7. Иницирование волны воспламенения:  
 а — температура газовой фазы; б — плотность смеси

Рассмотрим пример иницирования волны воспламенения из начального разрыва, согласованного по значениям параметров со стационарной структурой, т. е. когда все параметры смеси в зоне высокого давления задаются равными их конечным равновесным значениям в волне:

$$\Phi = \begin{cases} \Phi_0, & x < 0, \\ \Phi_k, & x \geq 0. \end{cases}$$

Результаты расчета для такого варианта течения, соответствующего данным рис. 3 и 5, т. е. когда выполнено условие  $\alpha < \alpha_*$ , представлены на рис. 7. Волна воспламенения формируется на длине в несколько десятков своих толщин и в момент времени  $t_1 = 0,403$  практически установилась. В ее хвосте видно возмущение плотности смеси, которое с ростом времени отстает от замороженной лидирующей УВ и затухает по амплитуде. Вероятно, возникновение этого возмущения связано со способом иницирования волны воспламенения методом толкающего поршня.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены одномерные движения смеси газа и реагирующих металлических частиц. С этой целью предложена двухскоростная двухтемпературная математическая модель, учитывающая химическую реакцию окисления дисперсной фазы, тепловыделение от которой происходит в обеих фазах.

На основе данной модели развита теория волны воспламенения в газозвеси частиц магния, что является обобщением теории теплового взрыва Н. Н. Семенова на случай движущихся континуумов реагирующих частиц.

Проведена классификация типов течения смеси за фронтом ударной волны в виде двух основных режимов:

- с воспламенением дисперсной фазы по механизму теплового взрыва;
- без воспламенения, с «регулярным» нагревом.

Время задержки воспламенения газозвеси, полученное расчетным путем, соответствует по порядку величины экспериментальным данным. В рамках нестационарного подхода продемонстрировано устойчивое распространение по смеси полученной стационарной структуры волны воспламенения. Приведен численный пример иницирования волны воспламенения в смеси с помощью толкающего поршня.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 99-01-00587) и INTAS OPEN (грант 97-20207).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М. Описание воспламенения и горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20, № 2. С. 3–9.
2. Федоров А. В. Воспламенение газозвесей в режиме взаимодействующих континуумов // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 4. С. 57–64.
3. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.



4. **Boiko V. M., Fedorov A. V., Fomin V. M.** Ignition of small particles behind shock waves // *Shock Waves, Explosions and Detonations* / J. R. Bowen, N. Manson, R. Soloukhin (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics. V. 87. 1983. P. 71-87.
5. **Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М.** Математическое моделирование воспламенения частиц металлов в высокотемпературном потоке за ударной волной // *Физика горения и взрыва*. 1982. Т. 18, № 3. С. 5-13.
6. **Fox J. W., TeVelde J. A., Nicholls J. A.** Shock wave ignition of metals powders // *Proc. 1976 Heat Transfer and Fluid Mech. Inst.*, Davis, Calif., 1976. Stanford, Calif., 1976. P. 241-256.
7. **Fedorov A. V., Gosteev Yu. A.** A numerical study of ignition of magnesium samples in spherical and cylindrical symmetry // *Conference Proc. 16th Intern. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, August 3-8, 1997, University of Mining and Metallurgy, AGH. Cracow, Poland, 1997. P. 299-302.
8. **Harten A.** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // *J. Comp. Phys.* 1983. V. 49, № 3. P. 357-393.
9. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Взаимодействие детонационных волн и волн разрежения в аэровзвеси частиц алюминия в кислороде // *Физика горения и взрыва*. 1997. Т. 33, № 2. С. 102-110.

*Поступила в редакцию 27/XII 1998 г.*

---