

УДК 532.529+541.126

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ В СМЕСИ ВОДОРОД — КИСЛОРОД — АРГОН С ЧАСТИЦАМИ АЛЮМИНИЯ

Т. А. Хмель, С. А. Лаврук

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск, khmel@itam.nsc.ru

Представлена физико-математическая модель гибридной детонации в смеси водород — кислород — аргон с добавками микродисперсных частиц алюминия. Горение водорода и алюминия описывается в рамках приведенной кинетики. В реакции горения алюминия учитывается образование субоксидов и частиц твердого оксида алюминия. Методами численного моделирования двумерных течений в плоском канале шириной 10 см исследованы процессы формирования и распространения ячеистой детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ при начальном давлении 0.26 атм с добавками частиц алюминия размером 3.5 и 5 мкм. Установлены свойства регуляризации и уменьшения размера ячеек, увеличение скорости фронта, пиковых давлений и температур в гибридной смеси в сравнении с газовой детонацией. Получены двухфронтные режимы, существующие ограниченное время. После слияния фронтов происходят ускорение детонации и переход к мелкоячеистой структуре. Зависимость между размером ячейки и средней скоростью детонации аналогична формуле пересжатой газовой детонации.

Ключевые слова: гибридная детонация, водородокислородная смесь, частицы алюминия, ячеистые структуры, численное моделирование.

DOI 10.15372/FGV2023.9298

EDN GGPTCQ

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к формированию и распространению ячеистой детонации в смесях газов с реагирующими твердыми частицами обусловлен потенциально широкими возможностями управления детонационными процессами путем изменения характеристик дисперсной фазы (загрузки, фракционного состава частиц, распределения концентраций). Например, в экспериментах [1] наблюдались двукратные скачки давления в гибридной детонации в смесях реагирующих газов с частицами алюминия. Теоретические подтверждения существования двухфронтных структур гибридной детонации на основе анализа стационарных решений Чепмена — Жуге и численного моделирования процессов инициирования плоских волн приведены в [2–4]. В [5] экспериментально исследовалось влияние частиц на характеристики газовой детонации в смеси водород — кислород — аргон, где, однако, двухфронтные профили регистрировались не только в смесях с реагирующими частицами (алюминия или магния), но и с инертными частицами (кар-

бида бора, оксида алюминия). В [6] приведены данные экспериментальных наблюдений, а в [7] — численного моделирования ячеистой (спиновой) детонации в реагирующих смесях с частицами алюминия, указывающие на изменение скорости детонации и размера ячейки. Утверждается, что в зависимости от диаметра частиц можно обеспечить режимы самоподдерживающейся детонации со скоростями либо большими, либо меньшими, чем скорость детонации Чепмена — Жуге чистой газовой смеси. Установлена корреляционная зависимость аррениусовского типа между средней скоростью распространения детонационного фронта в гибридной смеси и размером детонационной ячейки. В [8] методами численного моделирования анализировалось влияние частиц углерода на характеристики плоских волн и пространственных течений в смесях водород — кислород — азот.

В настоящей работе методами численного моделирования двумерных течений в смесях водород — кислород — аргон с частицами алюминия с описанием химических реакций в рамках приведенной кинетики исследуются процессы формирования и распростране-

ния ячеистой детонации. Целью исследования является получение данных о влиянии загрузки и дисперсного состава частиц на структуру течения и характеристики ячеистой детонации, такие как скорость распространения, характер и размеры детонационных ячеек.

1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИБРИДНОЙ ДЕТОНАЦИИ В РАМКАХ ПРИВЕДЕННОЙ КИНЕТИКИ

При построении модели гибридной детонации использованы подходы механики взаимодействующих континуумов в приближении слабозапыленной среды [9, 10]. Поскольку в задачах о формировании и распространении детонации по неподвижной смеси влияние пристеночных эффектов и турбулентных пульсаций на течение проявляется только в дальнем следе, описание проводится в рамках ламинарного подхода. Вязкость учитывается только в силах межфазного взаимодействия, влияние пограничных слоев и тепловые потери на стенках каналов пренебрегаются.

Основные уравнения Эйлера вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии газовой и дискретной фаз и сохранения массы компонентов газовой фазы. Описание горения водорода в смеси с кислородом и аргоном основано на модели одностадийной приведенной кинетики Бедарева, верифицированной в [11] по ряду параметров (задержка воспламенения, скорость детонации, размеры детонационных ячеек). Расчеты [12] в рамках этой модели показали хорошее согласование с экспериментальными данными по структурам течения при инициировании детонации в смеси водород — кислород — аргон быстролетящим телом. Горение мелкодисперсного алюминия описывается одной брутто-реакцией аррениусовского типа [13–15]. Условием воспламенения в ударной волне считается достижение частицей температуры плавления алюминиевого ядра $T_{ign} = 933$ К, при котором происходит разрыв оксидной пленки. На это указывают данные различных авторов по температуре воспламенения частиц, приведенные в обзоре [16]. С учетом того, что реакция взаимодействия алюминия с парами воды протекает на два порядка медленнее реакции окисления алюминия [17], пренебрегается взаимодействием алюминия с водородом и продуктами детонации водородокислородной смеси. Предполагается, что при сгорании алюминия образуются

как конденсированные продукты в форме наночастиц оксида алюминия, так и газообразные продукты окисления алюминия (субоксиды). Таким образом, рассматриваются газовая фаза (индекс 1) и две дискретные фазы: частицы алюминия (индекс 2) и образующиеся частицы твердого (или жидкого) оксида алюминия (индекс 3). Для газовой фазы учитываются следующие газовые компоненты: водород, кислород, вода, газообразные продукты окисления алюминия (смесь AlO , O , Al_2O , AlO_2 , Al_2O_2), обозначаемые соответственно H , O , H_{ox} , Al_{ox} . Массовая доля аргона задается в начальном состоянии, в дальнейшем определяется алгебраически.

Двумерные течения в декартовой системе координат описываются уравнениями

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \Gamma. \quad (1)$$

Вектор решения, векторы потоков и вектор правых частей состоят из соответствующих векторов для газовой фазы и дискретных компонентов:

$$W = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \\ G_3 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Для газовой фазы

$$W_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_H \\ \rho_O \\ \rho_{H,ox} \\ \rho_{Al,ox} \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_1 E_1 \end{pmatrix}, \quad F_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ \rho_H u_1 \\ \rho_O u_1 \\ \rho_{H,ox} u_1 \\ \rho_{Al,ox} u_1 \\ p + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p u_1 \end{pmatrix},$$

$$G_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_H v_1 \\ \rho_O v_1 \\ \rho_{H,ox} v_1 \\ \rho_{Al,ox} v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p + \rho_1 v_1^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p v_1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Для дискретных компонентов

$$W_i = \begin{pmatrix} \rho_i \\ \rho_i u_i \\ \rho_i v_i \\ \rho_i E_i \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho_i u_i \\ \rho_i u_i^2 \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i u_i E_i \end{pmatrix},$$

$$G_i = \begin{pmatrix} \rho_i v_i \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i v_i^2 \\ \rho_i v_i E_i \end{pmatrix}, \quad i = 2, 3. \quad (4)$$

Правые части уравнения (1) имеют следующий вид:

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} J_2 - J_3 \\ -J_H \\ J_H - J_{H,ox} + J_2 - J_{Al,ox} - J_3 \\ J_{H,ox} \\ J_{Al,ox} \\ -f_{2x} - f_{3x} + J_2 u_2 - J_3 u_3 \\ -f_{2y} - f_{3y} + J_2 v_2 - J_3 v_3 \\ -q_2 - q_3 - f_{2x} u_2 - f_{2y} v_2 - \\ -f_{3x} u_3 - f_{3y} v_3 + J_2 E_2 - J_3 E_3 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} -J_2 \\ f_{2x} - J_2 u_2 \\ f_{2y} - J_2 v_2 \\ q_2 + f_{2x} u_2 + f_{2y} v_2 - J_2 E_2 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_3 = \begin{pmatrix} J_3 \\ f_{3x} + J_3 u_3 \\ f_{3y} + J_3 v_3 \\ q_3 + f_{3x} u_3 + f_{3y} v_3 + J_3 E_3 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Система дополняется уравнениями состояния идеального газа

$$p = \rho_1 R T_1, \quad R = \frac{R_{un}}{\rho_1} \left(\frac{\rho_H}{\mu_H} + \frac{\rho_O}{\mu_O} + \right. \\ \left. + \frac{\rho_{H,ox}}{\mu_{H_2O}} + \frac{\rho_{Al,ox}}{\mu_{Al,ox}} + \frac{\rho_{Ar}}{\mu_{Ar}} \right) \quad (6)$$

и калорическими уравнениями состояния газа и частиц

$$E_1 = \frac{u_1^2 + v_1^2}{2} + c_{v,1} T_1 + \xi_{H,ox} Q_{H,ox} + \\ + \xi_{Al,ox} Q_{Al,ox} - c_{p,1} T_{00},$$

$$E_2 = \frac{u_2^2 + v_2^2}{2} + c_{v,2} T_2 + Q_{23},$$

$$E_3 = \frac{u_3^2 + v_3^2}{2} + c_{v,3} T_3. \quad (7)$$

Здесь $\mu_H, \mu_O, \mu_{H_2O}, \mu_{Ar}$ — молекулярные массы водорода, кислорода, воды и аргона соответственно, $\mu_{Al,ox}$ — средняя молекулярная масса газообразных продуктов окисления алюминия, R_{un} — универсальная газовая постоянная, c_p — теплоемкость смеси при постоянном давлении, $T_{00} = 298.15$ К [11]. Концентрации газовых компонентов определяются как $\xi_{H,ox} = \rho_{H,ox}/\rho_1$, $\xi_{Al,ox} = \rho_{Al,ox}/\rho_1$. Теплота образования воды принималась равной $Q_{H,ox} = -0.13$ МДж/моль, что обеспечивало в модели [11] согласование с данными экспериментов по скорости детонационной волны. Тепловой эффект сгорания алюминия с образованием частиц оксида алюминия обозначен Q_{23} и соответствует максимальному тепловыделению в гетерогенной детонации алюминия в кислороде при малых концентрациях алюминия. При условиях, когда горение алюминия происходит с образованием газообразных субоксидов, учитывается зависимость тепловыделения от стехиометрического соотношения алюминия и кислорода: $Q_{Al,ox} = (\mu_{Al}/\mu_{Al,ox})(Q_{23} - Q_2(\zeta))$, где $\zeta = \rho_2/(\rho_2 + \rho_O)$. Принимается используемая в [14, 15] формула $Q_2(\zeta) = 20.3 \exp(-3.17\zeta)$ МДж/кг, обеспечивающая соответствие данным [18] по зависимости скорости детонации в кислородной взвеси алюминия от концентрации частиц.

Система замыкается соотношениями для процессов массообмена между фазами и газовыми компонентами, обмена импульсами и теплообмена между газом и двумя твердыми фракциями частиц алюминия и частиц оксида алюминия.

Горение водорода в водородокислородных смесях, разбавленных аргоном, вида $\nu_H H_2 + O_2 + \nu_{Ar} Ar$ (ν_H, ν_{Ar} — стехиометрические коэффициенты) описывается на основе модели приведенной кинетики горения водорода [11, 12]

$$J_H = \nu_H \mu_H k_f \left(\frac{\rho_H}{\mu_H \cdot 10^3} \right)^m \left(\frac{\rho_O}{\mu_O \cdot 10^3} \right)^n,$$

$$J_{H,ox} = (J_H + \mu_O J_H / 2 \mu_H). \quad (8)$$

Здесь $k_f = 4 \cdot 10^5 T_1^w \exp(-E_a/R_{un} T_1)$ [с⁻¹] — коэффициент скорости химической реакции; E_a — энергия активации реакции окисления

водорода; степени при молярных концентрациях принимались равными $m = n = 0.7$, при температуре — $w = 0.8$.

Горение частиц алюминия описывается в рамках приведенной кинетики уравнением Аррениусовского типа с учетом неполного сгорания частиц:

$$J_2 = \begin{cases} 0, & T_2 < T_{ign}, \\ \frac{1}{\tau_2}(\rho_2 - \rho_{2k}), & T_2 > T_{ign}, \quad \rho_O > 0, \\ 0, & \rho_O = 0, \end{cases}$$

$$\tau_2 = \tau_{20}(d_2/d_0)^\theta \exp(E_a/RT_2). \quad (9)$$

Здесь ς — доля свободного кислорода в начальном составе смеси, начальный размер частицы $d_0 = 1$ мкм, время горения частиц $\tau_{20} = 0.00202$ мс, ρ_{2k} — остаточная часть алюминия, определяется как концентрация $\rho_k = 0.1\rho_{20}$, энергия активации E_a для частиц размером от 1 мкм принимается равной 32 кДж/моль, как и в [13]. В формуле (9) в зависимости времени горения от начального диаметра частиц d_2 показатель степени θ принимался равным 0.3 для $d_2 \leq 3.5$ мкм [16], для более крупных частиц в соответствии с переходом к диффузионному режиму горения принималось $\theta = 2$.

Предполагается, что при горении частицы образуются твердые (жидкие) наночастицы оксида алюминия, но при температурах выше температуры кипения оксида реакция протекает с образованием газообразных продуктов:

$$J_{Al,ox} = \begin{cases} 0, & T_1 < T_{3e}, \\ J_2(1 + 3\mu_{O_2}/4\mu_{Al}), & T_1 \geq T_{3e}, \end{cases}$$

$$J_3 = \begin{cases} J_2(1 + 3\mu_{O_2}/4\mu_{Al}), & T_1 < T_{3e}, \\ 0, & T_1 \geq T_{3e}. \end{cases} \quad (10)$$

Согласно данным различных авторов, обладающими компонентами в продуктах горения алюминия [17] или в продуктах детонации [19] являются AlO , Al_2O , атомарный кислород, газообразный алюминий. В простейшем приближении молекулярная масса этой смеси принимается постоянной (принимается $\mu_{AlO} = \mu_{O_2}$). Параметрические расчеты показали, что варьирование этого параметра в достаточно широких пределах слабо влияет на результаты расчетов по скорости детонации и структуре волны Чепмена — Жуге. Это можно объяснить

тем, что он входит только в формулу для газовой постоянной (6), где доминирующие слабые относятся к водороду (из-за его малой молекулярной массы) и инертному аргону при сильном разбавлении им водородокислородной смеси.

Силы межфазного взаимодействия и теплообмен задаются формулами:

$$f_{ix} = \frac{\rho_i}{\tau_{iu}}(u_1 - u_i), \quad f_{iy} = \frac{\rho_i}{\tau_{iu}}(v_1 - v_i),$$

$$q_i = \frac{\rho_i c_{v,i}}{\tau_{iT}}(T_1 - T_i), \quad i = 2, 3;$$

$$\tau_{iu} = 4d_i\rho_{ii}/3C_{Di}\rho_{11} \times \\ \times [(u_1 - u_i)^2 + (v_1 - v_i)^2]^{1/2}, \quad (11)$$

$$\tau_{iT} = d_i^2\rho_{ii}c_{vi}/6\lambda_1 Nu_i,$$

$$Nu_i = 2 + 0.6Re_i^{1/2}Pr^{1/3}.$$

Здесь C_{Di} — коэффициенты сопротивления частиц алюминия и образующегося оксида алюминия, определяемые известными формулами, учитывающими сверхзвуковое обтекание частиц [20], c_{v2} — теплоемкость частиц, Nu , Pr — числа Нуссельта и Прандтля (обычно принимается $Pr = 0.7$), λ_1 — теплопроводность газа. Изменением размера частиц в формулах (11) пренебрегается (в расчетах принималось $d_3 = 300$ нм), так как для алюминия процессы скоростной и тепловой релаксации определяют, главным образом, условия воспламенения. Горение алюминия и образование и рост частиц оксида алюминия протекают практически в условиях скоростного и теплового равновесия между фазами.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследуется формирование и распространение ячеистой детонации в плоском канале с непроницаемыми гладкими теплоизолированными стенками. В качестве инициирующего воздействия рассматривается разрыв диафрагмы, отделяющей камеру высокого давления (КВД, рис. 1). Принимается, что состав газа в

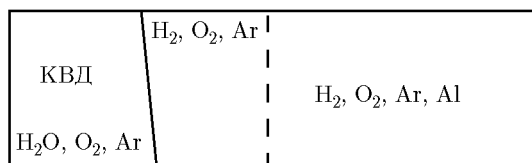


Рис. 1. Схема течения

камере включает в себя кислород, аргон и водяной пар (продукт сгорания водорода). В остальной части канала присутствуют водород, кислород, аргон и на некотором расстоянии от диафрагмы в канале равномерно распределены взвесь мелкодисперсных частиц алюминия. Развитие поперечных волн на начальной стадии формирования детонации в газе стимулируется за счет малого наклона диафрагмы. Параметры камеры выбираются таким образом, чтобы после разрыва диафрагмы в газе формировалась волна слабопересжатой детонации. При переходе детонации в облако частиц алюминия формируется и далее распространяется гибридная детонация.

Соответствующая начально-краевая задача для системы уравнений (1)–(5) формулируется в виде

$$t = 0, \quad W = \begin{cases} W_{cam}, & 0 \leq x < X_{cam}(y), \\ W_{G0}, & X_{cam}(y) \leq x < X_{cl}, \\ W_0, & X_{cl} \leq x < +\infty, \end{cases} \quad (12)$$

где W_{cam} — состояние в камере высокого давления, W_{G0} — начальное состояние газовой смеси перед облаком частиц, W_0 — начальное состояние смеси в облаке, $X_{cam}(y) = X_{cam0}(1 - \varepsilon y)$ — координата диафрагмы, X_{cl} определяет переднюю границу облака, ε — наклон диафрагмы, Y — ширина канала.

Граничные условия на стенках канала задаются в соответствии с условиями непротекания и теплоизолированности. На верхней и нижней стенках $\frac{\partial W'}{\partial y} = 0$, $W'_i = (\rho_i, \rho_i u_i, \rho_i E_i)^T$, $\rho_i v_i = 0$, на левой границе $\frac{\partial W''}{\partial x} = 0$, $W''_i = (\rho_i, \rho_i v_i, \rho_i E_i)^T$, $\rho_i u_i = 0$. На правой границе расчетной области, всегда находящейся на некотором расстоянии впереди ударного (детонационного) фронта, задается начальное невозмущенное состояние: $W = W_0$.

В качестве базовой схемы для газовой фазы используется схема класса TVD Хартена — Лакса, для частиц используется схема Джен-

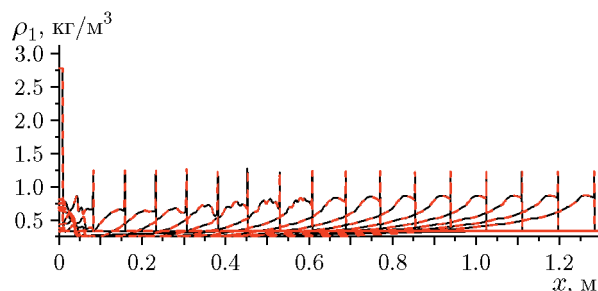


Рис. 2. Сравнение результатов расчетов в полной постановке и в ограниченной области с ее перемещением

три — Мартина — Дэйли. Метод описан в [21] и применялся в [13–15]. Часть расчетов проводилась со сдвигом расчетной области в сторону распространения детонации таким образом, чтобы область охватывала участок начального состояния, фронты и зоны горения, а также значительную часть волны разрежения. Отсекалась лишь дальняя зона, параметры которой не оказывают влияния на волновую картину фронтов. В этих случаях граничное условие на левой торцевой части расчетной области заменялось на $\frac{\partial W}{\partial x} = 0$. Данный алгоритм расчета позволяет проследить длительное распространение ячеистой детонации вдоль канала и получить информацию о трансформациях структур течения в гибридной детонации.

Допустимость такого подхода (используемого также авторами [7]) подтверждается сравнением результатов расчетов в канале полной длины и с перемещением расчетной области по мере продвижения фронта детонации в одномерной постановке. На рис. 2 представлены профили плотности газа с временным шагом 0.05 мс в одномерных расчетах инициирования и распространения гибридной детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ с частицами алюминия размером 3.5 мкм при загрузке $\rho_{20} = 20 \text{ г/м}^3$ и начальном давлении 0.26 атм. Видно, что линии, соответствующие решению в полной постановке (штриховые), и линии, соответствующие решению задачи в ограниченной перемещающейся области длиной 0.4 м (сплошные), практически полностью совпадают.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты проводились для бедной водородокислородной смеси, разбавленной аргонном,

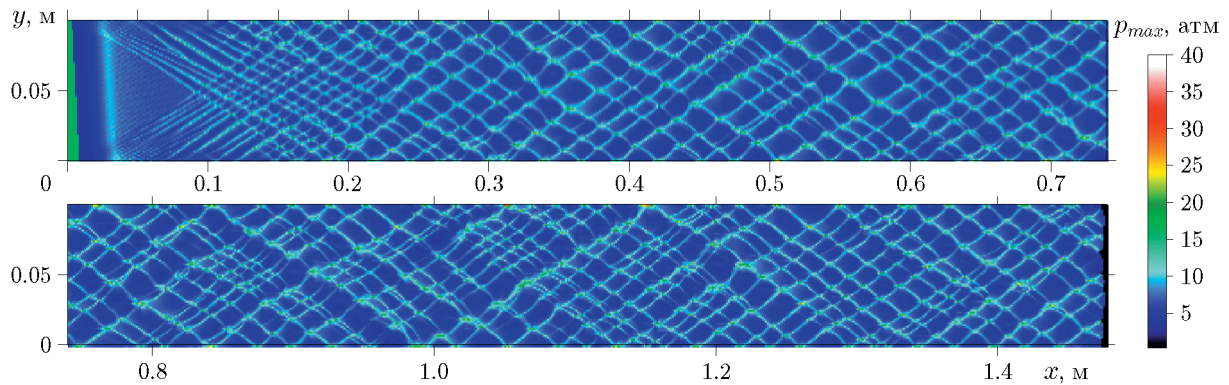


Рис. 3. Траектории тройных точек ячейистой детонации в газовой смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ при $p_0 = 0.26$ атм

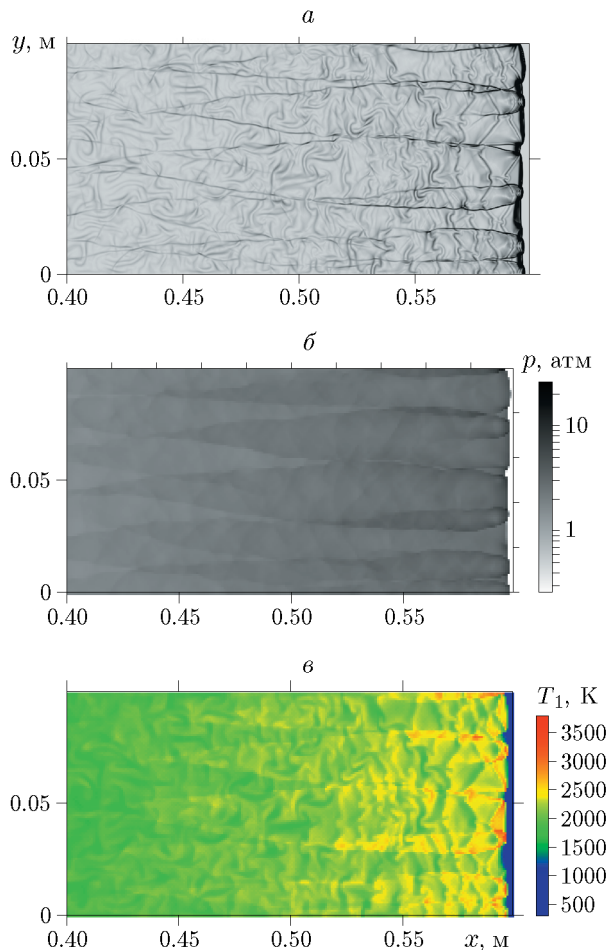


Рис. 4. Мгновенные картины течения газовой детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ при $p_0 = 0.26$ атм в момент времени $t = 0.4$ мс

состава $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ при начальном давлении 0.26 атм в канале шириной 10 см. Параметры в камере задавались следующими: $X_{\text{cam}0} = 0.01$ м, $p_{\text{cam}} = 2$ атм, $T_{\text{cam}} = 3000$ К, $X_{\text{cl}} = 0.015$ м. Взвесь частиц алюминия пред-

полагалась монодисперсной и однородной по концентрациям, загрузка варьировалась. Размер сферических частиц принимался равным 1, 3.5 и 5 мкм.

Ячейистая детонация в газовой смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ характеризуется слабо-регулярной ячейкой. На рис. 3 показаны картины истории максимального давления, выявляющие траектории тройных точек. Значения параметров в КВД выбраны так, что при инициировании первоначально формируется слабопересечастая детонация, которая затем ослабляется волной разрежения. По мере распространения фронта первоначально мелкая ячейка укрупняется, развивается слаборегулярная структура. Средняя ширина ячейки составляет 1.4 см, число ячеек при дальнейшем распространении примерно 6–7 на ширину канала, средняя скорость распространения фронта 1.46 км/с.

На рис. 4 показаны типичные для ячейистой газовой детонации мгновенные картины течения: численная шпирен-фотография (а), поле давления p (б) и поле температуры T_1 (в).

При добавлении в смесь частиц алюминия размером 3.5 мкм первоначально формируется картина детонации, подобная газовой, затем происходит перестроение ячейистой структуры в сторону уменьшения размеров ячейки. На рис. 5 представлены траектории тройных точек при различных загрузках частиц ($\rho_{20} = 10, 20, 50$ г/м³).

При малой загрузке частиц $\rho_{20} = 10$ г/м³ (рис. 5, а) формируется близкая к регулярной, хотя и неравномерная ячейка, а с увеличением загрузки при $\rho_{20} = 20$ и 50 г/м³ установившиеся ячейистые структуры регулярны и практи-

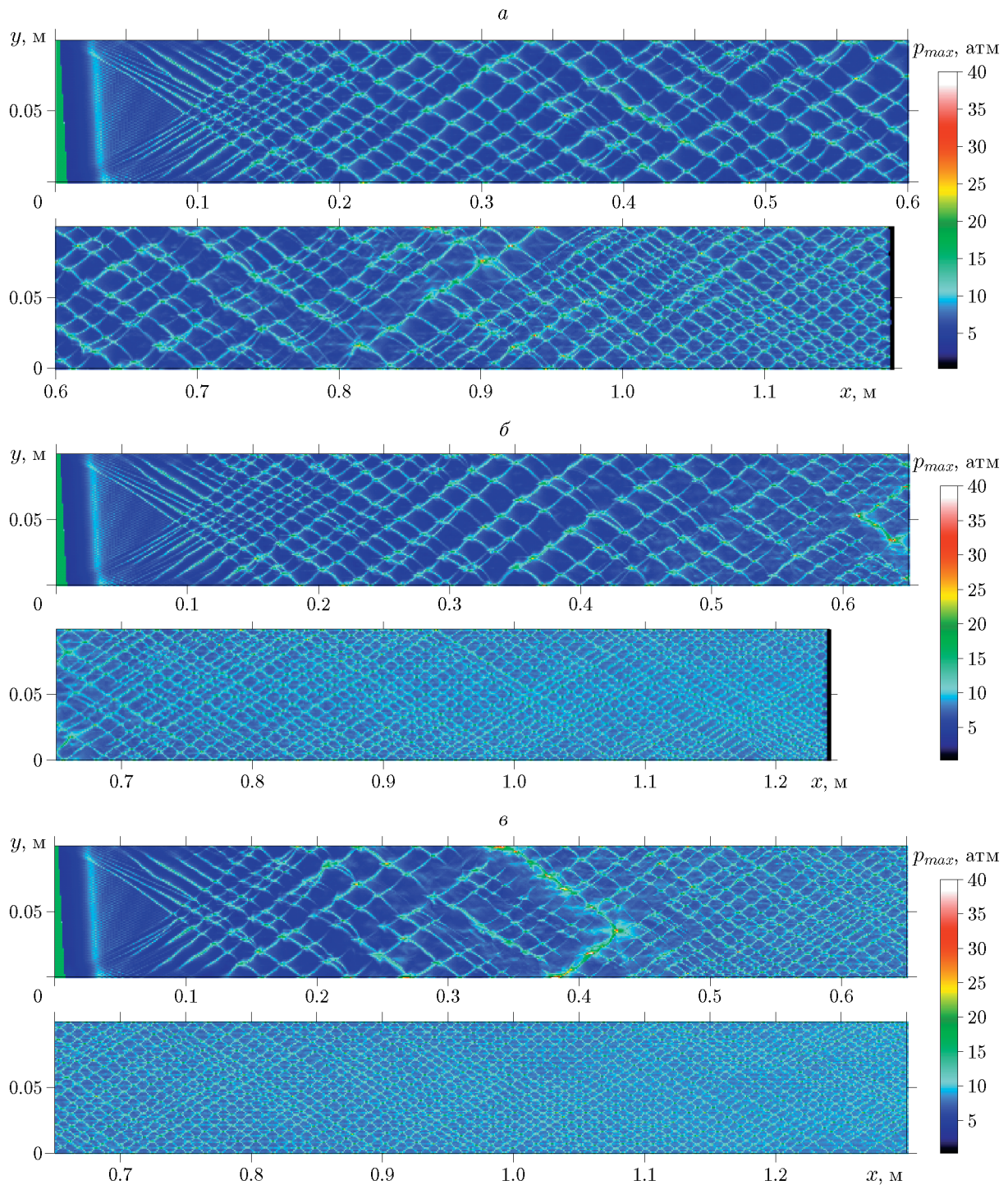


Рис. 5. Влияние загрузки частиц ($\rho_{20} = 10$ (а), 20 (б), 50 г/м³ (в)) на траектории тройных точек гибридной детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar} + \text{Al}$, $d_2 = 3.5$ мкм

чески равномерны. Размер ячейки уменьшается с увеличением начальной плотности частиц. Можно видеть резкие переходы от крупноячейстых к мелкоячейстым структурам на рис. 5,б в интервале $x = 0.6 \div 0.7$ м, на рис. 5,в — в

интервале $x = 0.35 \div 0.45$ м. Это обусловлено тем, что в дальней зоне течения возникают вторичные продольные ударные волны (подобие двухфронтовых структур), которые по мере распространения детонации догоняют лиди-

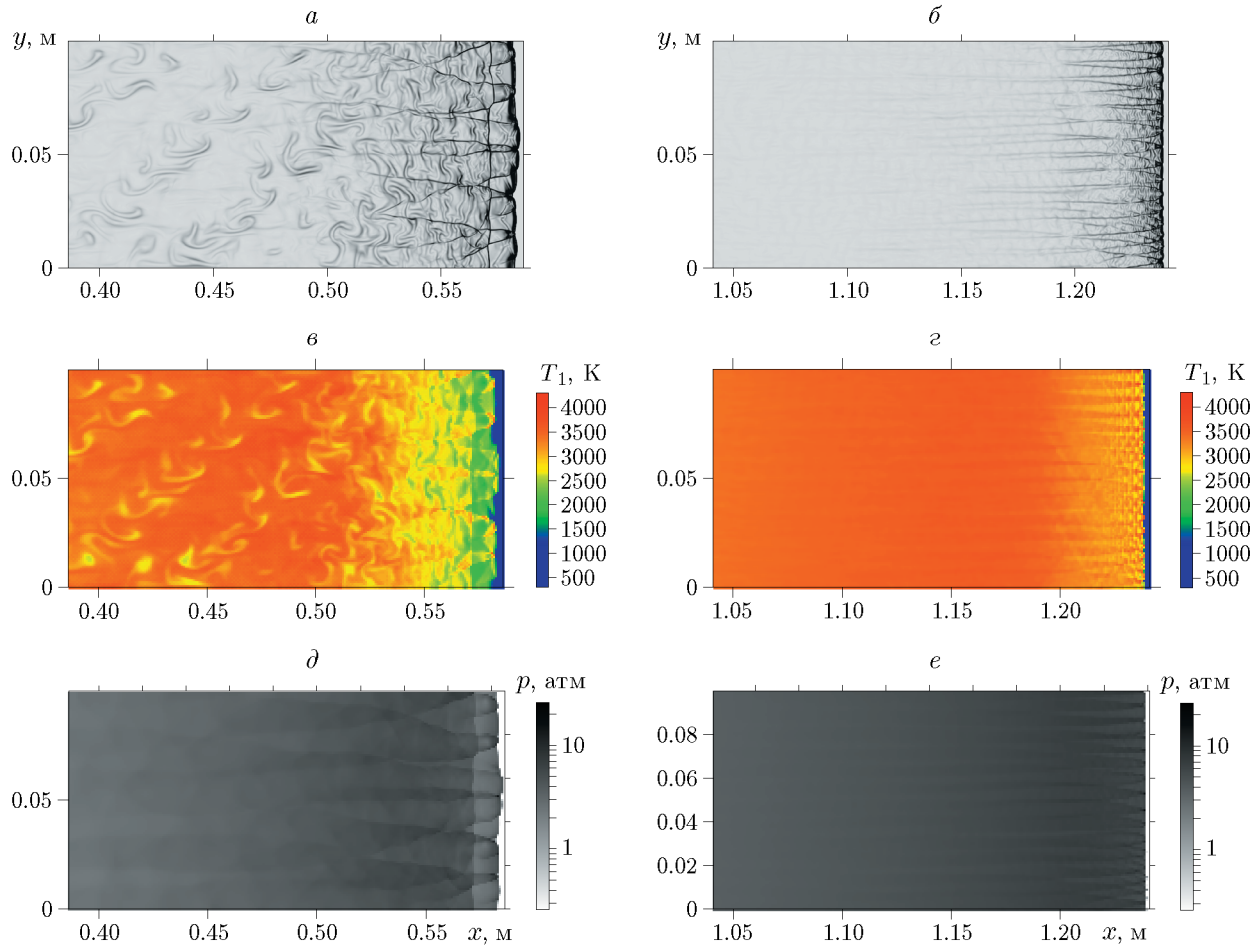


Рис. 6. Мгновенные картины параметров газовой фазы (ширлен-фотографии, поля температуры и давления) ячейистой гибридной детонации ($d_2 = 3.5$ мкм, $\rho_{20} = 20$ г/м³) в моменты времени $t = 0.4$ мс (а, в, д), 0.8 мс (б, г, е)

рующий фронт, сливаются с ним и обуславливают увеличение скорости детонации и уменьшение размера ячейки.

При увеличении загрузки до 20 г/м³ картина формирования мелкочейистой структуры аналогична, но происходит раньше (рис. 5,б). Здесь начиная с $x = 0.8$ м структура регулярна на большей части рассмотренной области, а при $\rho_{20} = 50$ г/м³ установление мелкочейистой структуры происходит уже к 0.6 м (рис. 5,в). На мгновенных картинах течения при $\rho_{20} = 20$ г/м³ четко видно наличие вторичного ударного фронта на расстоянии около $1 \div 1.5$ см от лидирующего фронта в момент времени $t = 0.4$ мс (рис. 6,а,в,д), и отсутствие такового в мелкочейистой структуре в момент $t = 0.8$ мс (рис. 6,б). Внутренний ударный фронт, протяженный на всю ширину канала, прослеживается на ширлен-фотографии, полях давления p

и температуры газа T_1 . Двухфронтовые кривые наблюдались при регистрации датчиками давления в экспериментах [1, 6] и теоретически подтверждены в [2, 3], где получены стационарные двухфронтовые структуры в системе, связанной с фронтом. В [4] подобные структуры моделировались в задачах инициирования плоских волн, где также обсуждались условия их реализации, а в [7] — в двумерных расчетах ячейистой детонации для взвесей частиц размером 13 мкм (для частиц 3.5 мкм получены обычные однофронтовые структуры). В [2–4] двухфронтовые структуры считались квазистационарными, динамика схождения или расхождения фронтов в [4] не прослеживалась. В [7] на картинах течения видно изменение расстояния между фронтами, но слияния и перехода к однофронтовой структуре не получено. В настоящих расчетах во всех рассмотренных ва-

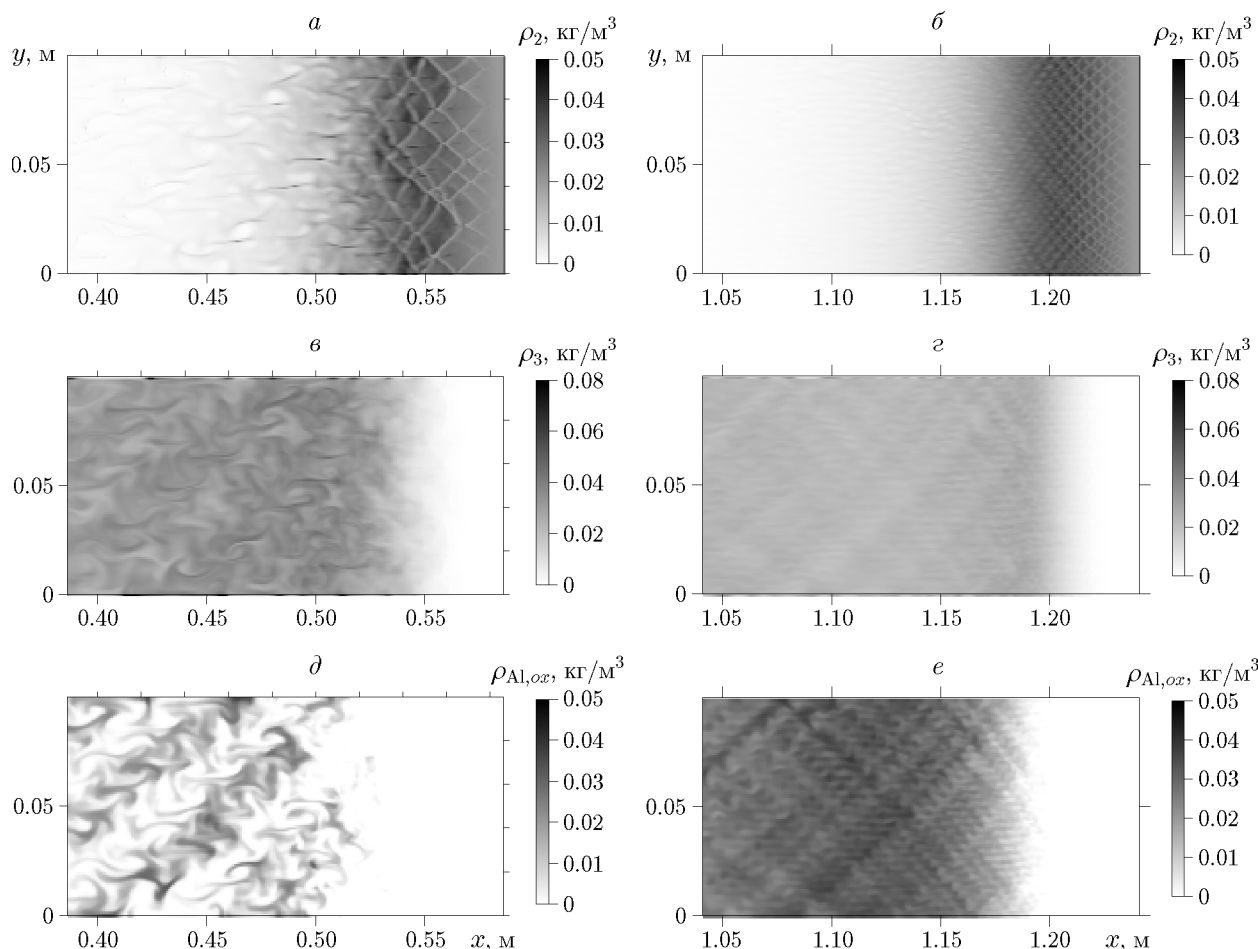


Рис. 7. Мгновенные картины плотности частиц алюминия, оксида алюминия и газообразных субоксидов в гибридной ячейистой детонации ($d_2 = 3.5$ мкм, $\rho_{20} = 20$ г/м³) в моменты времени $t = 0.4$ (а, в, д), 0.8 мс (б, г, е)

риантах двухфронтовые структуры не являются постоянными, со временем второй ударный фронт догоняет лидирующий фронт, что приводит к увеличению скорости детонации и, соответственно, перестройке ячейистой структуры в сторону уменьшения ячейки.

На картинах плотности алюминия и продуктов его горения на рис. 7 можно отметить следующие особенности. За фронтом лидирующей волны в зоне горения водорода имеется достаточно протяженный ρ -слой частиц алюминия. Наиболее быстрое сгорание частиц происходит в поперечных волнах, что отражается в виде сеточной структуры на распределении плотности алюминия (ρ_2). В продуктах детонации присутствуют как твердые частицы оксида алюминия, так и субоксиды алюминия, образующиеся при горении частиц в поле высоких температур. В установившемся режиме

на момент 0.8 мс (рис. 7,б,г,е) никаких вторичных фронтов не просматривается, поперечные волны регулярно расположены. На этой стадии распространения средние температуры выше, поэтому в продуктах горения алюминия газообразные оксиды ($\rho_{Al,ox}$) преобладают над твердыми частицами оксида алюминия (ρ_3).

Влияние размера частиц на формирующиеся структуры гибридной детонации иллюстрирует рис. 8. Уменьшение размера частиц до 1 мкм демонстрирует формирование структуры с размером ячейки меньше, чем в газовой детонации с последующим плавным переходом в еще более мелкаячейстую структуру (рис. 8,а). Двухфронтовые структуры в данной смеси не образуются. С увеличением размера частиц до $d_2 = 5$ мкм картина установления регулярной ячейистой структуры остается такой же, как и при $d_2 = 3.5$ мкм, с той же загрузкой

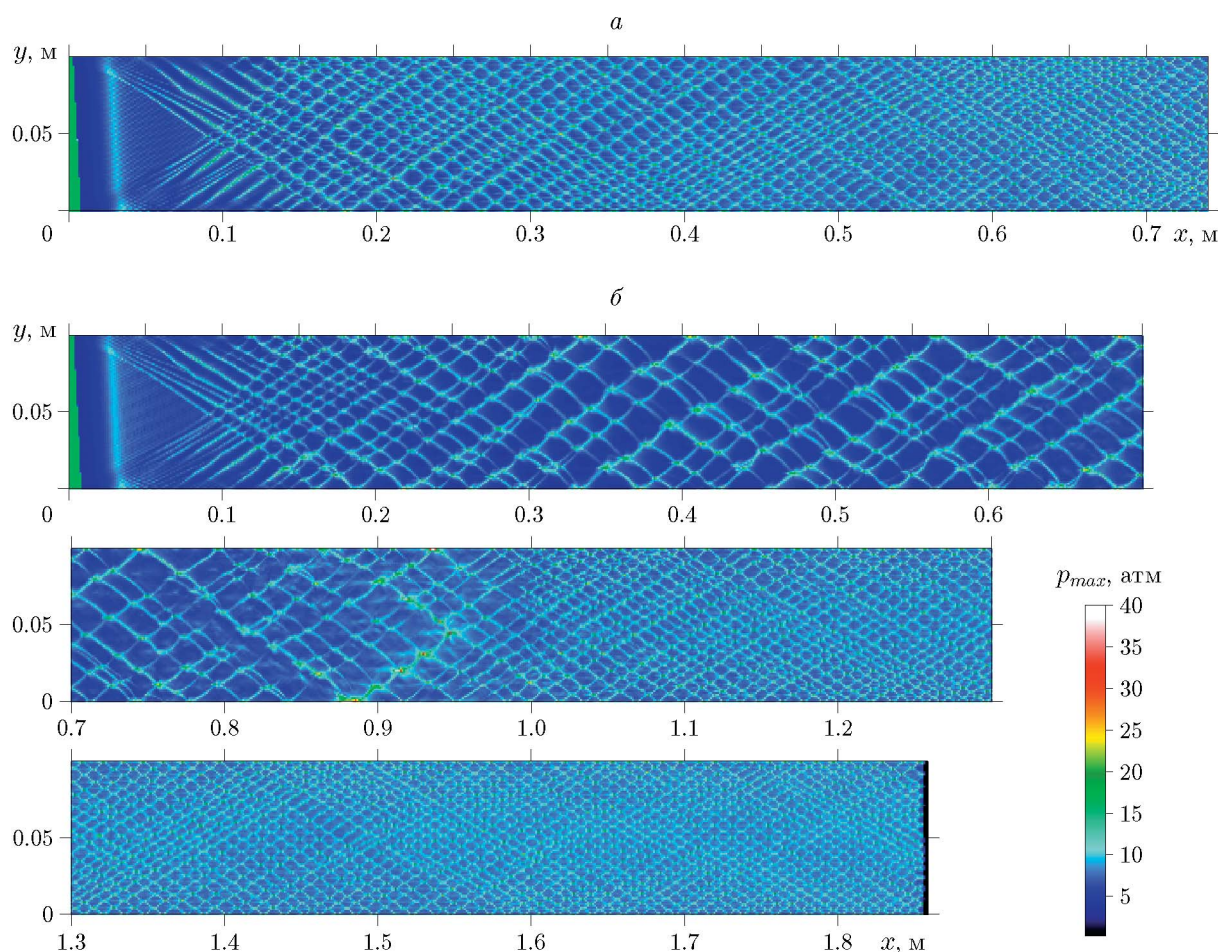


Рис. 8. Влияние размера частиц на струи гибридной ячейистой детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Al} + \text{Al}$:

a — $d_2 = 1$ мкм, $\rho_{20} = 10$ г/м³; $б$ — $d_2 = 5$ мкм, $\rho_{20} = 20$ г/м³

частиц (см. рис. 5,б), но переход к мелкогазовой ячейке с ускорением фронта детонации происходит позже (рис. 8,б). Оценки показывают, что для взвеси таких крупных частиц, какие использовались в экспериментах [6] и расчетах [7] (13 мкм), для формирования установившегося режима гибридной детонации требуется расстояние порядка 10 м. Возможно, эти режимы не достигались ввиду недостаточной протяженности трубы (6 м) в экспериментах [6], а представленные в [7] расчеты для частиц размером 13 мкм (4.8 м) ограничены, таким образом, моделированием лишь переходного этапа. Физические механизмы образования двухфронтовых структур остаются не до конца проясненными. Подобные структуры существуют не только в гибридной детонации: в экспериментах [5] двухфронтовые профили регистрировались в смеси водород — кислород — ар-

гон с инертными частицами, а в расчетах [22] моделировались в задаче инициирования гетерогенной детонации в бидисперсной взвеси частиц алюминия. Также образование вторичных скачков можно видеть на профилях давления в задачах взаимодействия детонационных волн с облаками инертного газа [23] или инертных частиц [24], где они впоследствии затухают. Возможно, образование вторичной внутренней ударной волны на фронте горения частиц алюминия обусловлено развитием продольных возмущений и их резонансным взаимодействием с лидирующим фронтом и с течением в зоне горения водорода. Подобный резонансный рост продольных возмущений обсуждается в [25] как способ эффективно осуществить переход горения в детонацию.

Обусловленное взаимодействием фронтов ускорение детонации можно видеть на рис. 9,

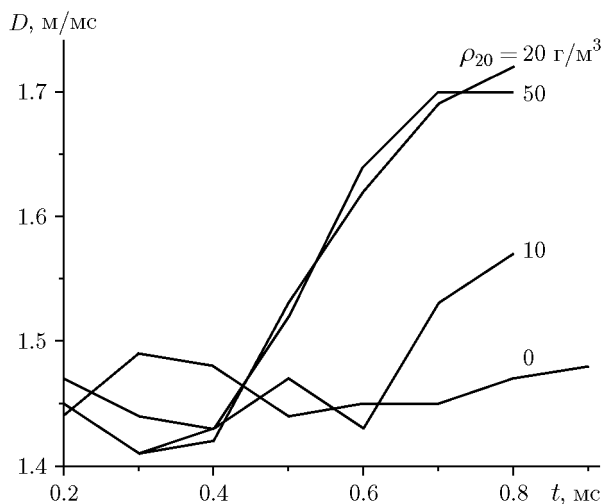


Рис. 9. Изменение осредненных на временных интервалах 0.1 мс скоростей фронта

где показаны осредненные по временным интервалам в 0.1 мс скорости фронта (определяемые по его положению на нижней стенке канала). Так, к моменту времени 0.8 мс скорость детонации достигает при $\rho_{20} = 10 \text{ г/м}^3$ значения 1.57 км/с, а при 20 и 50 г/м^3 соответственно 1.72 и 1.7 км/с. Таким образом, ячейистая детонация перестраивается с уменьшением размера ячейки. В установившихся режимах на ширину канала приходится 10 ячеек при $\rho_{20} = 10 \text{ г/м}^3$, 16 ячеек при 20 г/м^3 и 15 ячеек при 50 г/м^3 .

Связь между скоростью гибридной детонации и размером ячейки соответствует формуле, представленной в [6, 7]:

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \frac{D}{D_0} \exp \left\{ \frac{E}{RT_{\text{ZND}}} \left[\left(\frac{D_0}{D} \right)^2 - 1 \right] \right\}. \quad (13)$$

Здесь индекс 0 относится к газовой смеси без частиц, T_{ZND} — температура газа на лидирующем скачке в газовой детонации. В [6, 7] значения E , аппроксимирующие данные экспериментов, варьировались от 17 до 19 ккал/моль. На рис. 10 линия соответствует формуле (13), где $E/RT_{\text{ZND}} = 3.8$, что при $T_{\text{ZND}} = 1600 \text{ К}$ соответствует $E = 12 \text{ ккал/моль}$. Таким образом, формула (13), предложенная для оценки связи размера ячейки со скоростью фронта пересжатой газовой детонации, оказывается универсальной и пригодной для анализа гибридной детонации, что подтверждается как результатами экспериментальных измерений [6] и численных расчетов [7], так и результатами настоящей работы.

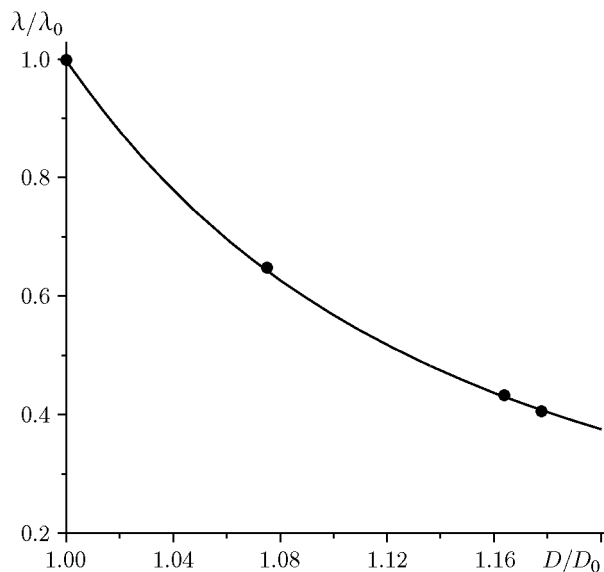


Рис. 10. Зависимость размера детонационной ячейки от скорости детонации

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках механики взаимопроникающих континуумов развита физико-математическая модель гибридной детонации в смеси водород — кислород — аргон с добавками микродисперсных частиц алюминия. Горение водорода описывается в рамках верифицированной модели приведенной кинетики Бедарева [11]. В реакции горения алюминия учитывается образование субоксидов и частиц твердого оксида алюминия.

На основе численного моделирования двумерных течений в плоском канале шириной 10 см изучены процессы формирования и распространения ячейистой детонации в смеси $0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar}$ при начальном давлении 0.26 атм с добавками частиц алюминия размером 3.5 и 5 мкм.

Установлены следующие результаты:

- добавка даже малого количества частиц алюминия способствует стабилизации течения и регуляризации ячеек;
- в установившемся режиме распространения гибридной детонации скорость фронта, пиковые давления и температуры выше, а размер ячейки меньше, чем в газовой детонации;
- двухфронтные режимы существуют ограниченное время, по мере распространения второй фронт догоняет лидирующий фронт и сливается с ним, при этом происходят ускорение детонации и переход к мелкоячейистой

структуре;

- связь между размером ячейки и средней скоростью детонации согласуется с формулой, представленной в [6, 7].

Полученные результаты указывают на возможность управления детонационными процессами в газовых смесях путем добавления малого количества мелкодисперсных частиц алюминия.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-10083, <https://rscf.ru/project/21-79-10083/>).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Khasainov B. A., Veyssiere B. Steady, plane, double-front detonations in gaseous detonable mixtures containing a suspension of aluminum particles // *Dynamics Explos.* — 1988. — P. 284–299. — DOI: 10.2514/5.9781600865886.0284.0299.
2. Veyssiere B., Khasainov B. A. A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension // *Combust. Flame.* — 1991. — V. 85, N 1-2. — P. 241–253. — DOI: 10.1016/0010-2180(91)90191-D.
3. Veyssiere B., Khasainov B. A. Structure and multiplicity of detonation regimes in heterogeneous hybrid mixtures // *Shock Waves.* — 1995. — V. 4, N 4. — P. 171–186. — DOI: 10.1007/BF01414983.
4. Khasainov B. A., Veyssiere B. Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures // *Shock Waves.* — 1996. — V. 6. — P. 9–15. — DOI: 10.1007/BF02511399.
5. Carvel R. O., Thomas G. O., Brown C. J. Some observations of detonation propagation through a gas containing dust particles in suspension // *Shock Waves.* — 2003. — V. 13. — P. 83–89. — DOI: 10.1007/s00193-003-0190-5.
6. Veyssiere B., Ingnoli W. Existence of the detonation cellular structure in two-phase hybrid mixtures // *Shock Waves.* — 2003. — V. 12, N 4. — P. 291–299. — DOI: 10.1007/s00193-002-0168-8.
7. Khasainov B. A., Veyssiere B., Ingnoli W. Numerical simulation of detonation cell structure in hydrogen-air mixture loaded by aluminum particles // *High-Speed Deflagration and Detonation: Fundamentals and Control* / G. Roy, S. Frolov, D. Netzer, A. Borisov (Eds). — Moscow: ELEX-KM Publ., 2001. — P. 163–174.
8. Velasco F. J. S., Otón-Martínez R. A., García-Cascales J. R., Espín S., Meynet N., Bentaib A. Modelling detonation of H_2 - O_2 - N_2 mixtures in presence of solid particles in 3D scenarios // *Int. J. Hydrogen Energy.* — 2016. — V. 41, N 38. — P. 17154–17168. — DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.06.096.
9. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. — М.: Наука, 1987. — Ч. 1, 2.
10. Яненко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. — Новосибирск: Наука, 1980.
11. Бедарев И. А., Рылова К. В., Федоров А. В. Применение детальных и приведенных кинетических схем для описания детонации водородовоздушных смесей с разбавителем // *Физика горения и взрыва.* — 2015. — Т. 51, № 5. — С. 22–33. — DOI: 10.15372/FGV20150503. — EDN: UMJFJX.
12. Bedarev I., Temerbekov V. Estimation of the energy of detonation initiation in a hydrogen-oxygen mixture by a high velocity projectile // *Thermal Sci.* — 2021. — V. 25, N 5B. — P. 3889–3897. — DOI: 10.2298/TSCI210115180B.
13. Федоров А. В., Хмель Т. А. Численное моделирование формирования ячеистой гетерогенной детонации частиц алюминия в кислороде // *Физика горения и взрыва.* — 2005. — Т. 41, № 4. — С. 84–98. — EDN: NXVFDT.
14. Khmel T. A., Lavruk S. A. Detonation flows in aluminium particle gas suspensions, inhomogeneous in concentrations // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2021. — V. 72. — 104522. — DOI: 10.1016/j.jlp.2021.104522.
15. Хмель Т. А., Лаврук С. А. Моделирование ячеистой детонации в газозвесах субмикронных частиц алюминия с различными распределениями концентрации // *Физика горения и взрыва.* — 2022. — Т. 58, № 3. — С. 3–18. — DOI: 10.15372/FGV20220301. — EDN: POBAYY.
16. Сандарам Д., Янг В., Зарко В. Е. Горение наночастиц алюминия (обзор) // *Физика горения и взрыва.* — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 37–63. — EDN: TQUWMP.
17. Старик А. М., Савельев А. М., Титова Н. С. Особенности воспламенения и горения композитных топлив, содержащих наночастицы алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 64–91. — EDN: TQUWMZ.
18. Veyssiere B., Khasainov B. A., Briand A. Investigation of detonation initiation in aluminum suspensions // *Shock Waves.* — 2008. — V. 18, N 4. — P. 307–315. — DOI: 10.1007/s00193-008-0136-z.

19. **Васильев В. М., Вольперт А. И., Клычников Л. В., Петров Ю. М., Салакатова Л. С., Стесик Л. Н.** Расчет параметров детонации смесей горючих веществ с воздухом // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 3. — С. 127–134.
20. **Хмель Т. А.** Моделирование динамических процессов в слабозапыленных и насыщенных газовзвесах (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 3. — С. 3–17. — DOI: 10.15372/FGV20210301. — EDN: CZIJJV.
21. **Хмель Т. А., Федоров А. В.** Численные технологии исследования гетерогенной детонации газовзвесей // Матем. моделирование. — 2006. — Т. 18, № 8. — С. 49–63.
22. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Структура и инициирование плоских волн детонации в бидисперсной газовзвеси частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 2. — С. 46–55. — EDN: JZGBOT.
23. **Tropin D., Bedarev I.** Physical and mathematical modeling of interaction of detonation waves with inert gas plugs // J. Loss Prev. Process Ind. — 2021. — V. 72. — 104595. — DOI: 10.1016/j.jlpr.2021.104595.
24. **Федоров А. В., Кратова Ю. В.** Расчет распространения детонационной волны в газовзвеси алюминиевых и инертных частиц // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 3. — С. 88–101. — EDN: QASQRR.
25. **Васильев А. А.** Резонанс колебаний в продуктах реакции и в исходной смеси как причина перехода горения в детонацию // Физика горения и взрыва. — 2022. — Т. 58, № 3. — С. 71–79. — DOI: 10.15372/FGV20220307. — EDN: UQTHOV.

Поступила в редакцию 19.01.2023.

После доработки 22.02.2023.

Принята к публикации 05.04.2023.