

УДК 536.46

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОСКИХ ВОЛН ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОВЗВЕСИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Т. А. Хмель, А. В. Фёдоров

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

Представлена физико-математическая модель детонации газовзвеси частиц алюминия нанометрового диапазона размеров с учетом перехода от континуального к свободномолекулярному режиму обтекания и теплообмена частиц. Предложена формула логарифмической интерполяции для времени тепловой релаксации в переходном режиме. Развита полумпирическая модель приведенной кинетики горения аррениусовского типа, обеспечивающая согласование с известными экспериментальными данными. Проанализированы стационарные структуры (Чепмена — Жуге, пересжатые), а также волны ослабляемой детонации нанодисперсных взвесей. Установлены характерные свойства детонации наноразмерных взвесей: режимы нормальной детонации соответствуют решениям в плоскости Чепмена — Жуге с конечным состоянием, звуковым по равновесной скорости звука; горение происходит практически в равновесной по скоростям и температурам смеси; имеется сильная зависимость протяженности зоны горения от амплитуды лидирующей ударной волны.

Ключевые слова: детонация, наноразмерные взвеси, горение алюминия, плоские волны, математическое моделирование.

DOI 10.15372/FGV20180208

### ВВЕДЕНИЕ

Мелкодисперсные порошки алюминия широко применяются в промышленных технологиях, что требует оценки их взрывоопасности. Кроме того, частицы алюминия в силу высокой энергетической способности имеют большие перспективы для использования в составе смесевых топлив и в установках детонационного сгорания. Поэтому исследование условий воспламенения, горения и характеристик режимов детонации микро- и наноразмерных порошков алюминия является актуальным. Проблемы детонации газовзвесей алюминия широко исследовались экспериментально и теоретически для частиц микроразмерного диапазона. Существует ряд моделей детонационного горения алюминия в воздухе, продуктах детонации газовых сред и кислороде с различной степенью детализации процессов воспламенения и горения частиц [1–4]. Для большинства задач ударно-волновых и детонационных процессов в газовзвесах мелких частиц теоретическое описание базируется на подходах механики гетеро-

генных сред [5, 6].

В работах [7, 8] построена модель гетерогенной детонации монодисперсных газовзвесей частиц алюминия размером  $1 \div 10$  мкм в кислороде, верифицированная по экспериментальным данным [9]. Результаты расчетов по этой модели процессов инициирования и распространения детонационных волн в каналах и в свободном пространстве, а также ячеистой детонации монодисперсных и полидисперсных взвесей приведены в [10–12]. В обобщенном виде они представлены в [13]. В последние годы интенсивно проводятся исследования в области нанодисперсных сред, появились новые экспериментальные данные по воспламенению, плавлению, теплообмену и горению субмикронных и нанометровых частиц алюминия. Обзор ряда экспериментальных и теоретических работ по проблемам горения наноразмерных частиц алюминия в различных кислородсодержащих средах и по сопутствующим вопросам теплообмена и воспламенения приведен в [14]. В [15–19] методами молекулярной динамики изучен процесс плавления наночастиц алюминия, в частности найдены выражения для зависимости теплоемкости и теплопроводности от размера и температуры, для зависимости времени

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-08-0778).

© Хмель Т. А., Фёдоров А. В., 2018.

плавления от размера частиц. Рассмотрен также ряд задач по определению тепловой истории наночастиц (решены соответствующие задачи Стефана) в феноменологической постановке. В [20] построена точечная модель горения наночастицы алюминия в условиях за отраженной ударной волной.

Целью настоящей работы является построение физико-математической модели детонации частиц алюминия субмикронного и нанометрового диапазонов на основе модификации модели [7, 8] с уточнением характеристик сопротивления и теплообмена частиц, а также с учетом изменения режима горения. Проведен анализ простейших стационарных структур детонации Чепмена — Жуге для взвесей частиц алюминия нанометрового диапазона.

## 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕТОНАЦИИ ВЗВЕСИ НАНОЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Основные уравнения модели отражают законы сохранения массы, импульса и энергии для каждой из фаз и всех компонентов. Система замыкается уравнениями состояния и соотношениями для процессов массообмена между компонентами (испарение, конденсация, горение), обмена импульсами (силы сопротивления) и теплообмена между газом и частицами. В простейшем случае одномерного течения слабозапыленных реагирующих газовзвесей (при малых объемных концентрациях частиц) уравнения имеют вид [1–3, 21]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial x} &= J_2, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2)}{\partial x} = -J_2, \\ \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho_1 u_1^2)}{\partial x} &= -f_2 + J_2 u_2, \\ \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2^2)}{\partial x} &= f_2 - J_2 u_2, \\ \frac{\partial \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial[\rho_1 u_1 (E_1 + p/\rho_1)]}{\partial x} &= -q_2 - f_2 u_2 + J_2 E_2, \\ \frac{\partial \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2 E_2)}{\partial x} &= q_2 + f_2 u_2 - J_2 E_2, \\ f_2 &= \frac{\rho_2}{\tau_u} (u_1 - u_2), \quad q_2 = \frac{\rho_2 c_{v,2}}{\tau_T} (T_1 - T_2), \quad (1) \\ p &= \rho_1 R T_1, \quad E_1 = \frac{u_1^2}{2} + c_{v,1} T_1, \quad e_2 = E_2 - \frac{u_2^2}{2}, \end{aligned}$$

$$c_{v,2} T_2 =$$

$$= \begin{cases} e_2 - Q, & T_2 < T_{melt}, \\ e_2 - Q - \alpha_{melt} Q_{melt}, & T_2 = T_{melt}, \\ e_2 - Q - Q_{melt}, & T_{melt} < T_2 < T_{evap}, \\ e_2 - Q - Q_{melt} - \alpha_{evap} Q_{evap}, & T_2 = T_{evap}, \\ e_2 - Q - Q_{melt} - Q_{evap}, & T_2 > T_{evap}. \end{cases}$$

Здесь индекс 1 относится к газу, 2 — к частицам. Используются следующие обозначения:  $p$  — давление,  $\rho_i = m_i \rho_{ii}$ ,  $u_i$ ,  $E_i$ ,  $T_i$ ,  $c_{v,i}$ ,  $m_i$  — соответственно средние плотность, скорость, полная энергия на единицу массы, температура, теплоемкость и объемная концентрация компонента  $i$ ,  $\rho_{ii}$  — истинная плотность,  $R$  — приведенная газовая постоянная,  $\tau_u$ ,  $\tau_T$  — время скоростной и тепловой релаксации,  $Q$  — тепловой эффект реакции горения частиц в рамках приведенной кинетики,  $Q_{melt}$ ,  $Q_{evap}$  — удельная теплота плавления и испарения алюминия,  $T_{melt}$ ,  $T_{evap}$  — температуры плавления и испарения алюминия,  $\alpha_{melt}$ ,  $\alpha_{evap}$  — доли расплавленного и испарившегося алюминия. Межфазное взаимодействие характеризуется параметрами  $J_2$  (массообмен),  $f_2$  (сила межфазного взаимодействия),  $q_2$  (теплообмен фаз).

Течения взвесей субмикронных и наноразмерных частиц значительно различаются характерными масштабами волновых структур и зон межфазного взаимодействия (скоростной, тепловой и химической релаксации). Для корректного описания условий воспламенения и характеристик предельных режимов детонации необходимо учитывать процессы, протекающие в узкой зоне непосредственно за фронтом ударной волны.

### 1.1. Сопротивление и теплообмен наноразмерных частиц

Процессы скоростной релаксации и теплообмена в газовзвесах наноразмерных частиц характеризуются переходом от континуального к свободномолекулярному режиму взаимодействия частицы с молекулами газа. Силы сопротивления в потоке газа частиц, размер которых сравним со средней длиной свободного пробега молекул газа, определяются с учетом поправочного коэффициент Каннингема [22, 23]:

$$\tau_u = 4d\rho_{22}C_C/3c_D\rho_{11}|u_1 - u_2|, \quad (2)$$

$$C_C = 1 + 2\text{Kn}[1.257 + 0.4 \exp(-1.1/2\text{Kn})].$$

Здесь  $\text{Kn} = RT_1/(\sqrt{2}\pi d_g^2 N_A \rho d_2)$  — число Кнудсена,  $d_2$ ,  $\rho_{22}$  — диаметр и собственная плотность частиц,  $d_g$ ,  $m_g$  — размер и масса молекулы окружающего газа,  $N_A$  — число Авогадро. Коэффициент сопротивления  $c_D$  определялся так же, как для микроразмерных частиц, с учетом сверхзвукового обтекания в детонационной структуре (см. [21, 10–12]):

$$c_D(\text{Re}, M_{12}) = \left[ 1 + \exp\left(-\frac{0.43}{M_{12}^{4.67}}\right) \right] \times$$

$$\times \left( 0.38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}} \right), \quad (3)$$

$$\text{Re} = \frac{\rho_{11} d |u_1 - u_2|}{\mu_1}, \quad M_{12} = \frac{|u_1 - u_2| \sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 P}},$$

где  $\mu_1$  — динамическая вязкость газа,  $\gamma_1$  — показатель адиабаты.

Теплообмен между газом и частицами субмикронных и нанометровых размеров определяется соответственно изменению режима обтекания частиц с континуального при  $\text{Kn} < 0.01$  в свободномолекулярный при  $\text{Kn} > 10$  [14, 24, 25]. Характерное время тепловой релаксации в указанных режимах имеет вид

$$\tau_T^{\text{cont}} = d^2 \rho_{22} c_{v2} / 6 \lambda_1 \text{Nu},$$

$$\text{Nu} = 2 + 0.6 \text{Re}^{1/2} \text{Pr}^{1/3}; \quad (4)$$

$$\tau_T^{\text{fm}} = \frac{d \rho_{22} c_{v2}}{6 \alpha p} \sqrt{\frac{8 \pi m_g T_1}{k_B}} \left( \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \right).$$

Здесь  $c_{v2}$  — теплоемкость частиц,  $\text{Nu}$ ,  $\text{Pr}$  — числа Нуссельта и Прандтля (обычно принимается  $\text{Pr} = 0.7$ ),  $\lambda_1$  — теплопроводность газа,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $\alpha$  — аккомодационный коэффициент. В диапазоне размеров частиц  $10 \text{ нм} \div 1 \text{ мкм}$  число Кнудсена меняется по порядку величины от 0.01 до 10; соответственно, режим обтекания является переходным. Существуют различные подходы к описанию теплообмена в переходной области. В [25], например, принимается  $\tau_T^{\text{tr}} = \tau_T^{\text{fm}} + \tau_T^{\text{cont}}$ . В настоящей работе для определения характерного времени теплообмена в переходной области используется сглаживающая функция на основе логарифмической интерполяции:

$$\tau_T^{\text{tr}} = \frac{1(\log \text{Kn} + 2)\tau_T^{\text{fm}} + (1 - \log \text{Kn})\tau_T^{\text{cont}}}{3}. \quad (5)$$

## 1.2. Воспламенение и горение наноразмерных частиц

Описание воспламенения и горения наноразмерных частиц алюминия основано на анализе эмпирических данных [14, 26–29].

В работах по детонации взвесей микроразмерных частиц алюминия [8, 10–12, 21] принимался температурный критерий воспламенения, т. е. считалось, что реакция начинается при достижении частицей критической температуры. Если воспламенение крупных частиц алюминия в статических условиях происходит за счет срыва теплового равновесия при окислении алюминия в диффузионном режиме, что реализуется при температуре порядка температуры плавления оксидной пленки (2300 К), то в случае детонации микроразмерных частиц температура воспламенения снижается до  $\approx 900 \text{ К}$  (что близко к температуре плавления алюминия). Для более точного определения критической температуры воспламенения взвеси в динамических условиях в [30] была рассмотрена задача о воспламенении сферических частиц алюминия в ударной волне с учетом поверхностных реакций окисления и полиморфных трансформаций оксида. Результаты расчета соответствуют известным экспериментальным данным по задержке воспламенения частиц алюминия в динамических условиях. На основании анализа расчетных данных получена формула для зависимости условной температурной границы воспламенения от температуры газа и размера частиц в диапазоне  $1 \div 10 \text{ мкм}$ . Минимальные значения составляют  $\approx 830 \text{ К}$  в кислороде и  $\approx 900 \text{ К}$  в воздухе, что можно считать адекватными температурами воспламенения мелких частиц при температуре газа  $T_1 < 1000 \text{ К}$ . Согласно многочисленным экспериментальным данным по воспламенению частиц алюминия, приведенным в [14], уменьшение размера частиц в области  $d < 1 \text{ мкм}$  практически не приводит к изменению порога воспламенения, т. е. минимальной температуры окружающего газа, при которой происходит воспламенение. В пределах разброса данных экспериментов эта температура также порядка 900 К.

Теоретическое объяснение воспламенения наноразмерных частиц при температурах, соответствующих точке плавления алюминия, дано в [31, 14]. Быстрый нагрев и плавление наноразмерных частиц в высокотемпературном потоке (что также характерно для микрораз-

мерных частиц в ударных волнах) обуславливает резкое термическое расширение ядра, что приводит к множественным разрывам поверхностной оксидной пленки и обуславливает старт реакции горения. Таким образом, температура плавления алюминия является пороговой температурой воспламенения частиц субмикронных и нанометровых размеров в динамических условиях. Исходя из известных данных в качестве критерия воспламенения наноразмерных взвесей принимается достижение частицами температуры плавления алюминия. Зависимость температуры плавления от размера наночастицы алюминия обсуждалась в [15–17, 19]. Для частиц размером от 50 нм температуру плавления можно считать постоянной:  $T_{ign} = T_{melt} = 930$  К.

Горение частиц алюминия нанометровых размеров характеризуется переходом от диффузионно-лимитированного горения крупных частиц (более 10 мкм) к кинетическому режиму [14]. Зависимость времени горения от размера частиц имеет степенной характер. Если в диффузионном режиме показатель степени меняется в пределах  $1.5 \div 2$ , то в переходном режиме может быть  $\leq 1$ , при этом наблюдаются аррениусовская зависимость от температуры и степенная зависимость от содержания кислорода в окружающей частицу газе.

Для смесей кислорода с азотом время горения частицы  $\tau_b$  также подчиняется степенной зависимости от концентрации окислителя  $C_{ox}$  (в диапазоне  $0.2 \div 0.5$ ) и аррениусовской зависимости от температуры окружающего газа:  $\tau_b \sim \exp(E_a/RT)C_{ox}^{-\varphi}$  [28].

Экспериментальные [28] и аппроксимирующие зависимости  $\tau_b(C_{ox})$  приведены на рис. 1. Видно, что определенный авторами [28] показатель степени  $\varphi = -0.4$  хорошо описывают данные экспериментов на участке  $0.2 \div 0.4$  (штриховая линия на рис. 1). Для насыщенных кислородом сред (при  $0.5 \leq C_{ox} \leq 1$ ) более адекватной является предложенная нами зависимость с  $\varphi = -0.7$  (сплошная линия на рис. 1).

Зависимости времени горения частиц от температуры окружающего газа приведены на рис. 2. Значками отмечены данные экспериментов [28] по горению частиц алюминия размером 80 нм в смеси кислорода с азотом при  $C_{ox} = 0.5$  и различных давлениях. Линиями представлены аррениусовские зависимости. В [28] были определены различные энергии активации при  $p = 8$  и 32 атм: соответственно 75

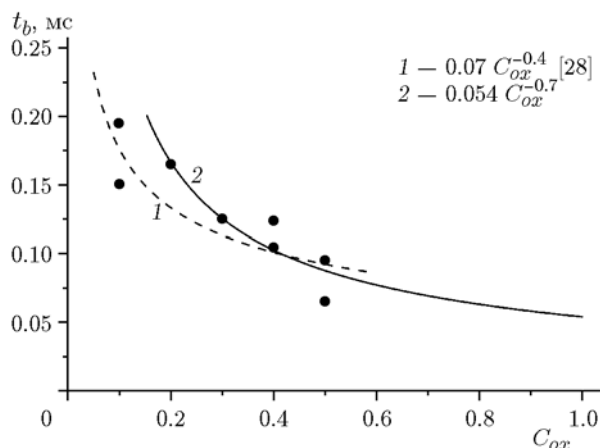


Рис. 1. Зависимость времени горения частиц диаметром 80 нм в смеси  $O_2 + N_2$  от содержания окислителя при давлении 32 атм и температуре 1500 К:

значки — эксперименты [28], линии — степенные функции

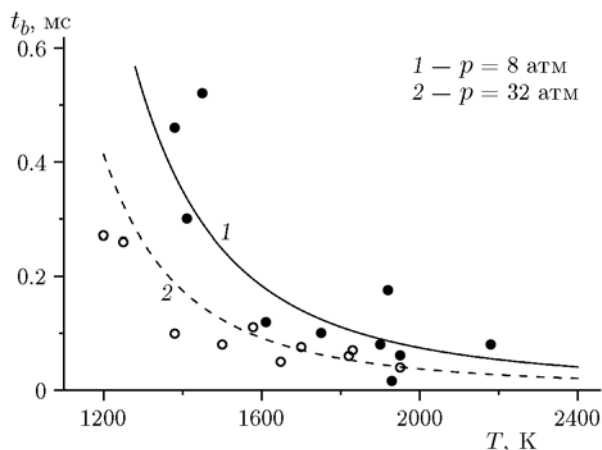


Рис. 2. Зависимость времени горения частиц диаметром 80 нм в смеси  $O_2 + N_2$  от температуры окружающего газа:

значки — эксперименты [28], линии — зависимости вида  $A \exp(E_a/RT)p^{-0.5}$  при  $E_a = 60$  кДж/моль

и 50 кДж/моль. Нами для обоих случаев выбрано одинаковое значение  $E_a = 60$  кДж/моль при зависимости от давления  $\tau_b \sim p^{-m}$  (соответствующие функции  $A \exp(E_a/RT)p^{-0.5}$  показаны на рис. 2). Как видно, кривые удовлетворительно описывают данные экспериментов в пределах их разброса, и в дальнейшем значения  $E_a = 60$  кДж/моль,  $m = 0.5$  используются в расчетах детонации для частиц размером  $50 \div 250$  нм.

Связь между временем горения микроразмерных и наноразмерных сферических частиц алюминия и их начальным диаметром обсуждается в [14]. По данным [14] время горения частиц алюминия в диапазоне размеров  $10 \div 100$  нм в смеси кислорода с азотом подчиняется зависимости  $\tau_b \sim d^n$  при  $n \approx 0.3$ . Продолжение этой зависимости до микронного диапазона позволяет получить согласование с данными [29] по времени горения частиц диаметром 3 мкм.

Таким образом, обобщение приведенных в [14, 28] данных по горению частиц алюминия позволило в настоящей работе для описания детонационного горения стехиометрической взвеси алюминия ( $d_0 \leq 250$  нм) в кислороде принять выражение

$$\tau_\xi = \tau_0(d/d_0)^{0.3} \exp(E_a/RT_1)(p/p_*)^{-m} \quad (6)$$

с константами  $d_0 = 80$  нм,  $p_* = 8$  атм,  $E_a = 60$  кДж/моль,  $m = 0.5$ ,  $\tau_0 = 0.25$  мкс.

Следует заметить, что в модели детонации [8], используемой при анализе и численном моделировании взвесей микронных частиц [10–13, 21], зависимость времени горения от диаметра принята соответствующей диффузионному режиму горения ( $\tau_b \sim d^2$ ), при этом зависимость от давления не учитывалась. Кинетика реакция взята в аррениусовском виде с энергией активации 32 кДж/моль (вдвое меньше, чем для наночастиц алюминия), что отражает переходный режим горения. Изменение закона горения в переходной области учитывалось в работе [32], где в интервале диаметров частиц  $1 \div 3$  мкм при  $E_a = 32$  кДж/моль и  $m = 0$  использовалась зависимость предэкспонента от диаметра вида  $\tau_0 \sim d^{0.3}$ . Промежуточный (субмикронный) интервал размеров частиц  $300 \div 800$  нм, ввиду неопределенности законов изменения энергии активации приведенной реакции горения  $E_a$  и параметра  $m$ , нами не рассматривался.

## 2. УРАВНЕНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ СТРУКТУР ДЕТОНАЦИИ

Детонация взвесей частиц алюминия характеризуется развитием поперечных волн, свойственных ячеистой детонации (аналогично газовым смесям), и обычно моделируется двумерными расчетами. Однако для получения начальных сведений о структурах детонации на

первом этапе рассмотрим стационарные плоские волны.

Согласно теории Зельдовича — Неймана — Дёринга структура детонации состоит из лидирующего скачка в газовой фазе и примыкающей зоны тепловой, скоростной и химической релаксации, в которой также происходят процессы плавления и испарения алюминия. Течение за лидирующей ударной волной описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \rho_1 u_1 + \rho_2 u_2 &= c_1, & \rho_1 u_1^2 + \rho_2 u_2^2 + p &= c_2, \\ \rho_1 u_1(E_1 + p/\rho_1) + \rho_2 u_2 E_2 &= c_3, \\ u_2 \frac{du_2}{dy} &= \frac{1}{\tau_u}(u_1 - u_2), & u_2 \frac{dT_2}{dy} &= \frac{T_1 - T_2}{\tau_T} \\ && \text{при } T_2 \neq T_{melt}, T_2 \neq T_{evap}; \\ u_2 \frac{d\alpha_{melt}}{dy} &= \frac{c_{v,2}(T_1 - T_{melt})}{Q_{melt}\tau_T} \\ && \text{при } T_2 = T_{melt}, \alpha_{melt} < 1; \\ u_2 \frac{d\alpha_{evap}}{dy} &= \frac{c_{v,2}(T_1 - T_{evap})}{Q_{evap}\tau_T} \\ && \text{при } T_2 = T_{evap}, \alpha_{evap} < 1; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho_2 u_2)}{dy} &= \\ &= \begin{cases} 0, & T_2 < T_{ign}, \\ -\frac{\rho(\xi - \xi_{cond})\alpha_{melt}}{\tau_0} \left(\frac{d}{d_0}\right)^{-0.3} \times \\ \quad \times \exp\left(-\frac{E_a}{RT_1}\right) \left(\frac{p}{p_*}\right)^m, & T_2 \geq T_{ign}; \end{cases} \\ p &= \rho_1 RT_1, & E_1 &= \frac{u_1^2}{2} + c_{v,1} T_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_2 &= u_2^2/2 + \\ &+ c_{v,2} T_2 + Q + \alpha_{melt} Q_{melt} + \alpha_{evap} Q_{evap}. \end{aligned}$$

Здесь  $\rho = \rho_1 + \rho_2$  — плотность смеси,  $\xi = \rho_2/\rho$  — массовая концентрация частиц,  $\xi_{cond}$  — доля несгоревших частиц,  $\tau_T$ ,  $\tau_\xi$ ,  $\tau_u$  — характерные времена теплообмена, горения и скоростной релаксации. Константы  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  определяются по начальному состоянию смеси и скорости фронта детонационной волны:

$$c_1 = (\rho_{10} + \rho_{20})u_0, \quad c_2 = c_1u_0 + p_0, \quad (8)$$

$$c_3 = \rho_{10}u_0(E_{10} + p/\rho_{10}) + \rho_{20}u_0E_{20}$$

(индекс 0 относится к начальному состоянию смеси перед фронтом детонационной волны).

В расчетах учитывается зависимость теплоемкости газа от температуры в форме [33]

$$c_{v,1}(T_1) = R/(\gamma_1 - 1),$$

$$\gamma_1 = \quad (9)$$

$$= \begin{cases} \gamma_0 - \alpha_1 \left( \frac{e_1}{e_*} \right)^\beta, & e_g \leq e_*, \\ \gamma_\infty + (\gamma_* - \gamma_\infty) \exp \left( \alpha_2 \frac{1 - e_1}{e_*} \right), & e_1 \leq e_*, \end{cases}$$

с константами для кислорода  $e_* = 0.7$  МДж/кг,  $\gamma_0 = 1.41$ ,  $\gamma_\infty = 1.234$ ,  $\gamma_* = 1.32$ ,  $\alpha_1 = 0.09$ ,  $\alpha_2 = 0.32$ ,  $\beta = 1.5$ .

Скорость стационарной детонации  $u_0$  и интегральное тепловыделение реакции  $Q$  являются связанными параметрами. Согласно экспериментальным данным [34] по детонации микроразмерных хлопьевидных частиц и сферических частиц алюминия размером 100 нм, скорость детонации слабо зависит от размера частиц, что также подтверждают расчеты [35]. В настоящей работе для кислородных взвесей стехиометрического состава принимается скорость  $u_0 = 1.6$  км/с, как и для микроразмерных взвесей [8, 13], что соответствует данным экспериментов [9] и расчетов [35]. Более низкая скорость детонации в кислородных взвесах, в сравнении с воздушными, объясняется неполным сгоранием частиц в детонационной волне (наличием остаточного алюминия), а также недоокислением алюминия (наличие субоксидов в продуктах детонации обсуждается в [3, 36]). В рамках приведенной кинетики интегральное тепловыделение  $Q$  определяется из условий соответствия решения стационарной волне нормальной детонации. В детонации с недогоранием частиц такие решения могут быть двух типов: либо с конечным равновесным состоянием, звуковым по равновесной скорости звука (волны Чепмена — Жуге (ЧЖ)), либо решения с внутренней особой точкой, звуковой по замороженной скорости звука (недожатые режимы) [8]. Параметрический анализ структур показал зависимость типов

решений от параметров релаксации (соотношений характерных времен тепловой релаксации и горения) [8]. Равновесная и замороженная скорости звука определяются из следующих соотношений [8]:  $c_f^2 = \gamma_1 p / \rho_1 = \gamma_1 R T_1$ ,  $c_e^2 = \gamma p / \rho = \gamma(1 - \xi) R T_1$ ,  $\gamma = 1 + R(1 - \xi) / c_v(\xi)$ ,  $\xi = \rho_2 / (\rho_1 + \rho_2)$ ,  $c_v(\xi) = c_{v1}(1 - \xi) + c_{v2}\xi$ . В интервале размеров частиц  $50 \div 250$  нм значения  $E_a$ ,  $m$  и других параметров, включая параметры релаксации, существенно отличаются от данных для микроразмерных частиц.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Особенностью стационарных структур детонации наноразмерных частиц является значительное различие масштабов зон релаксации (скоростной и тепловой) и зоны горения: параметр  $\beta = \tau_T / \tau_\xi$  очень мал. Согласно [8] решение должно соответствовать режиму ЧЖ с конечным равновесным состоянием, звуковым по равновесной скорости звука. Для принятого значения  $u_0 = 1.6$  км/с с учетом (9) режим ЧЖ достигается при  $Q = 4.15$  МДж/кг. Отметим, что при этом значении скорости фронта в структуре волны ЧЖ расчетные значения температуры не достигают точки кипения алюминия.

#### 3.1. Особенности структуры в зоне тепловой и скоростной релаксации

На рис. 3 показаны распределения параметров непосредственно за фронтом лидирующей ударной волны в монодисперсных взвесах частиц размером  $50 \div 250$  нм и для сравнения в газовзвеси частиц размером 2 мкм. Для рассмотренных взвесей наноразмерных частиц структуры зон тепловой и скоростной релаксации подобны, но отличны от структуры зон в случае микроразмерных частиц. Основное различие состоит в том, что в нановзвесах процессы релаксации фаз протекают намного быстрее химической реакции, поэтому влияние горения и связанного с ним тепловыделения в этих зонах ничтожно. В газовзвеси микронных частиц скорость горения сопоставима с характерными скоростями процессов релаксации, что обуславливает заметный рост температуры газа уже на стадии плавления частицы ( $T$  — изгиб [8]). Как видно из рис. 3, фаза плавления (полочка на профилях  $T_2$ ) составляет заметную долю зоны скоростной и тепловой релаксации.

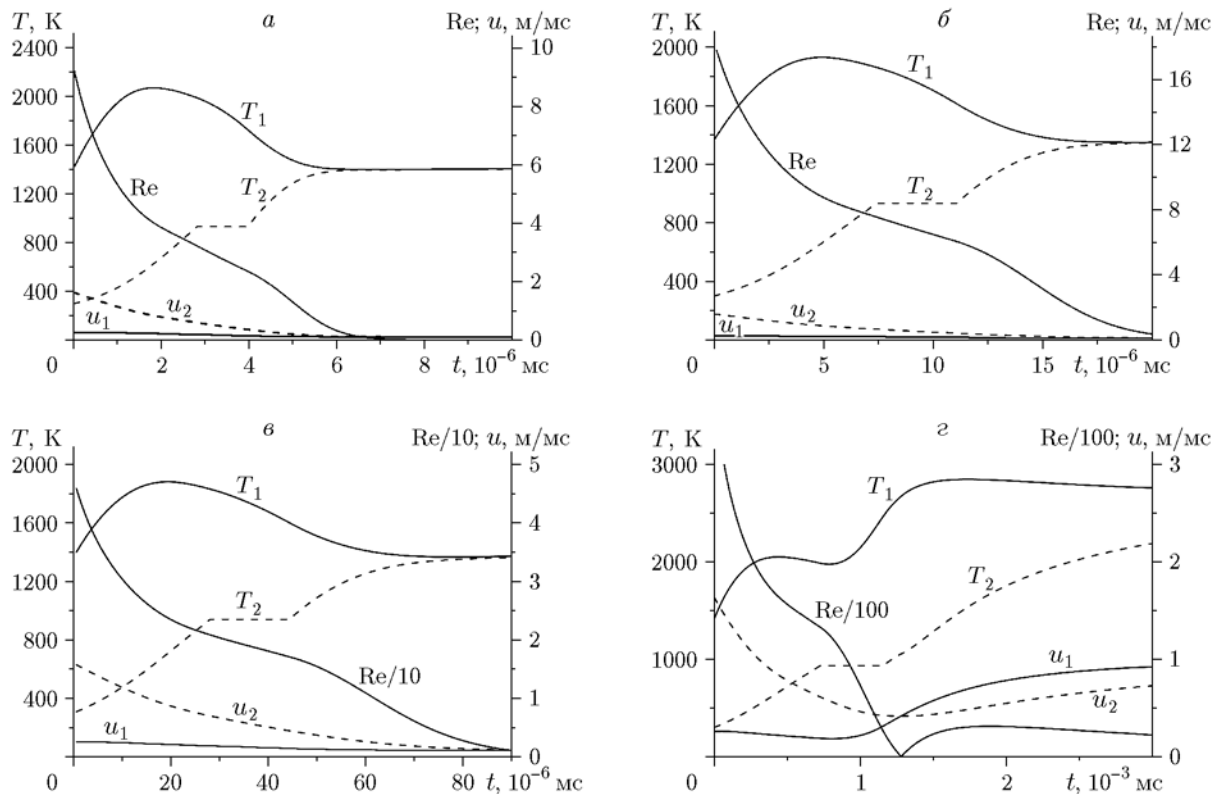


Рис. 3. Распределения параметров газа (сплошные линии) и частиц (штриховые линии) диаметром 50 нм (а), 100 нм (б), 250 нм (в), 2 мкм (г) в зонах тепловой и скоростной релаксации волн ЧЖ

Также отметим, что в структуре детонации нановзвесей относительное число Рейнольдса в зоне релаксации уменьшается плавно и асимптотически стремится к нулю, тогда как в структуре релаксации микронной взвеси имеется точка пересечения скоростей, наличие которой обусловлено инерционными свойствами частиц, где терпят излом число Рейнольдса (рис. 3,г) и характерные времена релаксации (рис. 4,г).

На рис. 4 показаны распределения параметров, характеризующих режимы обтекания и теплообмена: числа Кнудсена, характерных времен скоростной и тепловой релаксации фаз. Линии  $\tau_T^{fm}$ ,  $\tau_T^{tr}$  соответствуют вычислениям по формуле (5) средних значений  $\tau_T$  в переходном режиме. Характерное время переходного режима  $\tau_T^{tr}$  для взвесей частиц диаметром  $d = 50 \div 250$  нм находится между временами, соответствующими непрерывному и свободномолекулярному режимам обтекания. Как видно,  $\tau_T^{cont}$  и  $\tau_T^{fm}$  максимально различаются (при  $d =$

50 нм более чем в пять раз) на фронте ударной волны, где число Кнудсена достигает максимума, и сближаются к концу зоны релаксации.

Числа Кнудсена для частиц диаметром 250 нм находятся в интервале  $0.02 \div 0.07$ , соответственно режим теплообмена характеризуется как переходный до 0.02 мкс, далее он ближе к непрерывному ( $\tau_T^{tr}$  близко к  $\tau_T^{cont}$ ). Для частиц диаметром 2 мкм число Кнудсена около 0.01, режим теплообмена всюду непрерывный. Коэффициент Каннингема  $C_C$  в формуле для скоростной релаксации (2) превышает 1.1 при  $Kn > 0.05$ , т. е. для частиц размером до 100 нм учет этого фактора в расчетах детонации необходим. Для субмикронных частиц (от 500 нм) влияние эффектов свободномолекулярного обтекания и теплообмена в детонационных течениях мало.

### 3.2. Структуры нормальной детонации

На рис. 5 показаны профили параметров в зоне горения в режимах нормальной детонации

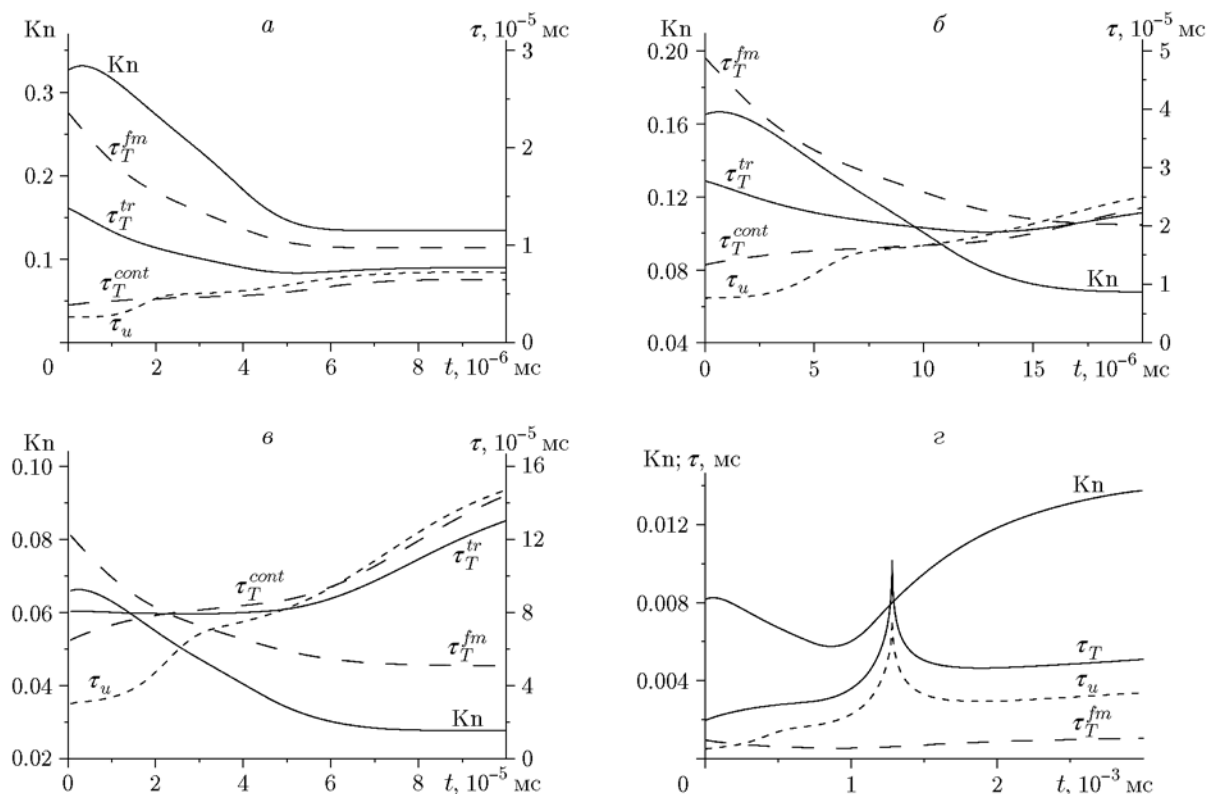


Рис. 4. Распределения числа Кнудсена и характерного времени релаксации фаз в режиме ЧЖ для частиц диаметром 50 нм (а), 100 нм (б), 250 нм (в), 2 мкм (г)

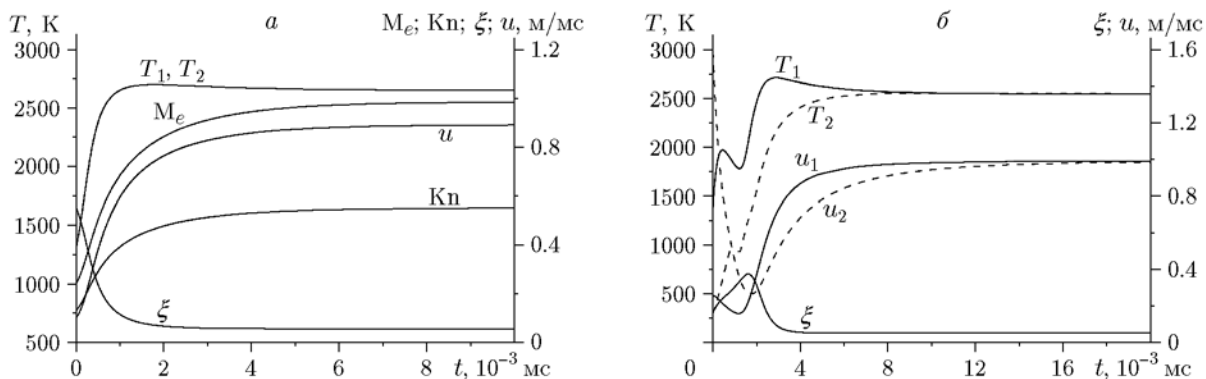


Рис. 5. Структуры нормальной детонации взвесей частиц диаметром 50 нм (а) и 2 мкм (б) в различных режимах:

а — режим со скоростью звука в равновесном состоянии, б — со скоростью звука в замороженном состоянии

ции взвесей частиц диаметром 50 нм и 2 мкм. Стационарное решение на рис. 5, а соответствует режиму ЧЖ с конечным состоянием, звуковым по равновесной скорости звука ( $M_e \rightarrow 1$ ), а на рис. 5, б — режиму с внутренней звуковой по замороженной скорости звука точкой, через которую решение проходит по сепаратрисе в сверхзвуковое равновесное состояние недосжа-

той детонации [8]. Видно, что профили скоростей фаз и температур фаз в случае  $d = 50$  нм накладываются друг на друга (рис. 5, а), число Кнудсена в зоне горения возрастает до 0.54, а в случае  $d = 2$  мкм на всем протяжении зоны горения тепловая и скоростная неравновесность сохраняются (рис. 5, б).



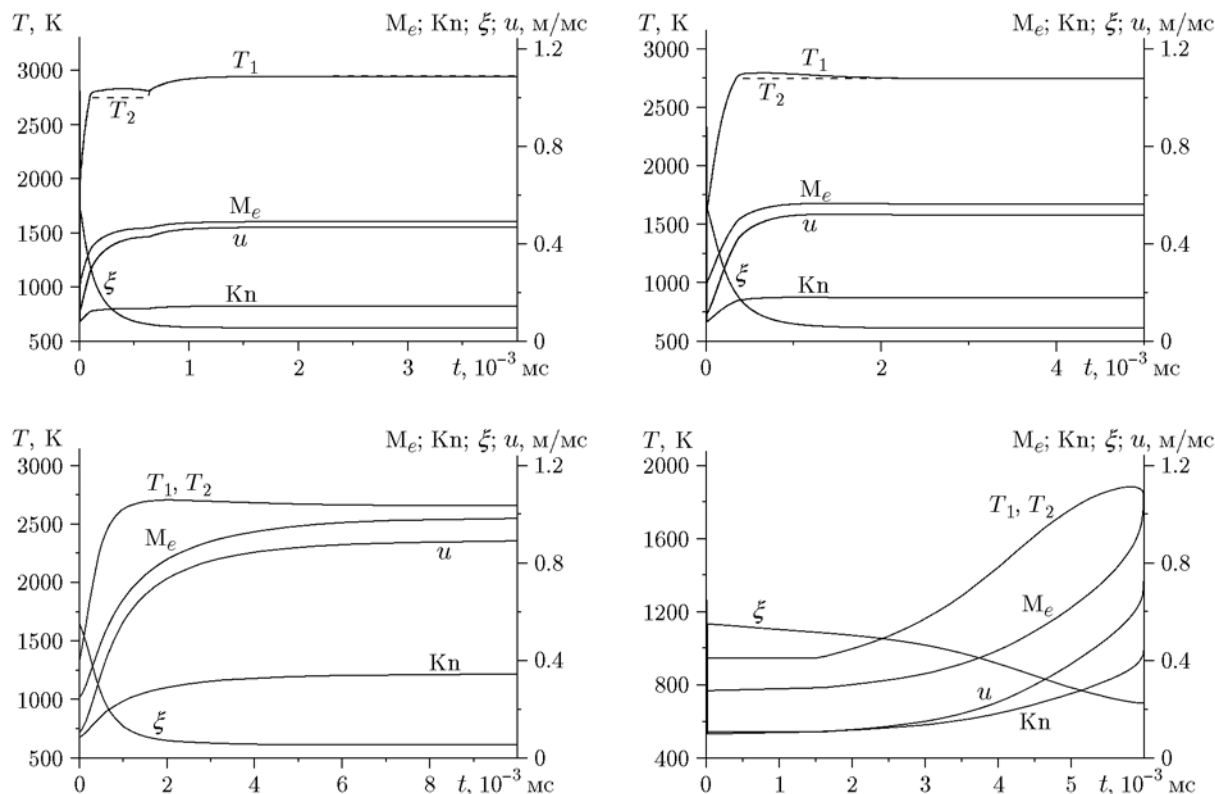


Рис. 6. Влияние амплитуды лидирующей волны на структуру детонации взвеси частиц диаметром 80 нм при начальной скорости волны  $u_0 = 2$  (а), 1.8 (б), 1.6 (в), 1.2 км/с (г)

### 3.3. Структуры пересжатых и затухающих волн детонации

Поскольку реальные детонационные волны распространяются в режиме ячеистой детонации, где на фронте присутствуют участки пересжатых и ослабляемых волн, представляет интерес рассмотреть эти структуры в квазистационарном подходе. На рис. 6 показаны примеры пересжатых волн детонации в газозвеси частиц диаметром 80 нм (рис. 6, а, б), для сравнения приведены структура нормальной детонации ЧЖ (рис. 6, в) и участок решения, отвечающего затухающей волне с  $u_0 = 1.2$  км/с (рис. 6, г). Видно, что в пересжатых волнах стадия испарения алюминия при  $T_2 = T_{evap}$  присутствует (в [34] этот процесс учитывался в расчетах детонации воздушных взвесей алюминия). При  $u_0 = 2$  км/с процесс испарения заканчивается в зоне горения (параметр  $\alpha_{evap}$  достигает значения 1), далее температуры газа и алюминия мгновенно сравниваются. В волне с  $u_0 = 1.8$  км/с полного испарения алюминия не происходит (параметр  $\alpha_{evap}$  выходит на некоторое равновесное значение  $< 1$ , а рав-

новесная температура газа и частиц соответствует температуре испарения алюминия). Отметим, что расчеты детонации микроразмерных взвесей с учетом испарения алюминия показали аналогичное свойство: стадия испарения присутствует лишь в пересжатых волнах.

Структура волны ослабляемой детонации не может быть получена в рамках стационарного подхода, так как стационарных решений, соответствующих скорости ниже скорости ЧЖ, не существует. На рис. 6, г представлена лишь часть структуры, определяемая из решения уравнений (7)–(9), где начиная примерно с 0.005 мс решение уходит на «линию записания»  $M_f = 1$  (при этом правые части уравнений (7) неограниченно возрастают) [8, 13]. Тем не менее, сравнивая решения для пересжатых волн, решения ЧЖ и части структуры «низкоскоростной» детонации, можно отметить сильную зависимость длины зоны реакции от амплитуды лидирующей ударной волны. Это обусловлено высокой энергией активации реакции горения наночастиц алюминия (в соответствии с [14, 28]). Данный фактор может иметь значе-

ние для характеристик режимов ячеистой детонации (регулярных либо нерегулярных).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В работе представлена модель детонации взвесей частиц алюминия диаметром  $50 \div 250$  нм в кислороде с учетом плавления и испарения алюминия. В описании обтекания и теплообмена принимается во внимание переход от континуального режима к свободномолекулярному. Предложена формула логарифмической интерполяции для определения характерного времени тепловой релаксации в переходном режиме.

2. Константы уравнения приведенной кинетики горения определены в соответствии с известными экспериментальными данными по зависимости времени горения наноразмерных частиц от давления и температуры окружающего газа, содержания окислителя и диаметра частиц.

3. Проанализированы структуры стационарной детонации Чепмена — Жуге, пересжатых волн и затухающей детонации (в квазистационарном подходе). Установлены общие и отличительные свойства детонации микроразмерных и наноразмерных взвесей.

4. Особенностью детонационной структуры нановзвесей является различие масштабов релаксационных процессов и процесса горения частицы. В силу значительного преобладания времени горения над временами скоростной и тепловой релаксации, структуры нормальной детонации нановзвесей отвечают решениям ЧЖ с конечным состоянием, звуковым по равновесной скорости звука, тогда как для микроразмерных частиц структуры соответствуют решениям с внутренней точкой, звуковой по замороженной скорости звука.

5. В структуре зоны скоростной релаксации наноразмерных частиц относительное число Рейнольдса плавно убывает до нуля, тогда как в микроразмерных взвешах распределение  $Re$  и параметров релаксации немонотонно и характеризуется наличием излома, связанного с пересечением профилей скоростей фаз.

6. В кислородных взвешах частиц алюминия (наноразмерных и микроразмерных) в волнах ЧЖ и затухающей детонации температура частиц не достигает температуры кипения алюминия, а стадия испарения алюминия присутствует только в пересжатых детонационных волнах.

7. В силу высокой энергии активации реакции горения наночастиц алюминия длительность горения сильно зависит от амплитуды лидирующей ударной волны, что может иметь значение для характера регулярности режимов ячеистой детонации.

### 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. Афанасьева Е. А., Левин В. А. Воспламенение и горение частиц алюминия за ударными и детонационными волнами // Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 1. — С. 8–14.
3. Veysiere B., Khasainov B. A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension // Combust. Flame. — 1991. — V. 85. — P. 241–253.
4. Zhang F., Gerrard K., Ripley R. C. Reaction mechanism of aluminum-particle-air detonation // J. Propul. Power. — 2009. — V. 25. — P. 845–858.
5. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. Ч. 1, 2. — М.: Наука, 1987.
6. Яненко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. — Новосибирск: Наука, 1980.
7. Федоров А. В. Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // Физика горения и взрыва. — 1992. — Т. 28, № 3. — С. 72–83.
8. Fedorov A. V., Fomin V. M., Khmel' T. A. Non-equilibrium model of steady detonations in aluminum particle-oxygen suspensions // Shock Waves. — 1999. — V. 9, N 5. — P. 313–318.
9. Strauss W. A. Investigation of the detonation of aluminum powder-oxygen mixtures // AIAA Journal. — 1968. — V. 6, N 12. — P. 1753–1761.
10. 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.
11. Федоров А. В., Хмель Т. А. Формирование и вырождение ячеистой детонации в бидисперсных газозвзвешах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 109–120.
12. Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Особенности ячеистой детонации в полидисперсных газозвзвешах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 5. — С. 85–94.

13. **Федоров А. В., Фомин В. М., Хмель Т. А.** Волновые процессы в газозвесах частиц металлов. — Новосибирск: Параллель, 2015.
14. **Сандарам Д., Янг В., Зарко В. Е.** Горение наночастиц алюминия (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 37–63.
15. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц металла // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 2. — С. 23–29.
16. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 4. — С. 68–75.
17. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 3. — С. 55–59.
18. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Молекулярно-динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанобъекта алюминия // Физика горения и взрыва. — 2016. — Т. 52, № 3. — С. 45–50.
19. **Федоров А. В., Шульгин А. В., Лаврук С. А.** Описание плавления наноразмерных образцов алюминия // Физика горения и взрыва. — 2016. — Т. 52, № 4. — С. 94–100.
20. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной ударной волне // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 3. — С. 47–51.
21. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Численное моделирование инициирования детонации при вхождении ударной волны в облако частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 1. — С. 114–122.
22. **Wang C., Friedlander S. K., Madler L.** Nanoparticle aerosol science and technology: an overview // China Particuology. — 2005. — V. 3, N 5. — P. 243–254.
23. **Madler L., Friedlander S. K.** Transport of nanoparticles in gases: overview and recent advances // Aerosol Air Qual. Res. — 2007. — V. 7, N 3. — P. 304–342.
24. **Filippov A. V., Rosner D. E.** Energy transfer between an aerosol particle and gas at high temperature ratios in the Knudsen transition regime // Intern. J. Heat Mass Transf. — 2000. — V. 43, N 1. — P. 127–138.
25. **Kuhlmann S.-A., Reimann J., Will S.** On heat conduction between laser-heated nanoparticles and a surrounding gas // Aerosol Sci. — 2006. — V. 37. — P. 1696–1716.
26. **Huang Y., Risha G. A., Yang V., Yetter R. A.** Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle dust in air // Proc. Combust. Inst. — 2007. — V. 31. — P. 2001–2009.
27. **Huang Y., Risha G. A., Yang V., Yetter R. A.** Effect of particle size on combustion of aluminum particle dust in air // Combust. Flame. — 2009. — V. 156. — P. 5–13.
28. **Bazyn T., Krier H., Glumac N.** Combustion of nanoaluminum at elevated pressure and temperature behind reflected shock waves // Combust. Flame. — 2006. — V. 145. — P. 703–713.
29. **Lynch P., Krier H., Glumac N.** A correlation for burn time of aluminum particles in the transition regime // Proc. Combust. Inst. — 2009. — V. 32. — P. 1887–1893.
30. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Характеристики и критерии воспламенения взвесей частиц алюминия в детонационных процессах // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 2. — С. 76–88.
31. **Levitas V. I., Pantoya M. L., Chauhan G., Rivero I.** Effect of the alumina shell on the melting temperature depression for aluminum nanoparticles // J. Phys. Chem. C. — 2009. — V. 113, N 32. — P. 14088–14096.
32. **Федоров А. В., Хмель Т. А., Лаврук С. А.** Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. 2. Влияние параметров // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 1. — С. 81–90.
33. **Fedorov A. V., Khmel T. A., Gosteev Yu. A.** Theoretical investigation of ignition and detonation of coal-particle gas mixtures // Shock Waves. — 2004. — V. 13. — P. 453–463.
34. **Zhang F., Murray S. B., Gerrard R. B.** Aluminum particle-air detonation at elevated pressures // Shock Waves. — 2006. — V. 15. — P. 313–324.
35. **Briand A., Veyssiere B., Khasainov B. A.** Investigation of detonation initiation in aluminium suspensions // Shock Waves. — 2008. — V. 18. — P. 307–315.
36. **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.

*Поступила в редакцию 27/IV 2017 г.*