

УДК 532.529.5+541.126

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОВЗВЕСЯХ СУБМИКРОННЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Т. А. Хмель

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

Методами численного моделирования исследуется ячеистая детонация в монодисперсных взвесах субмикронных и наноразмерных частиц алюминия. Используются подходы механики гетерогенных сред. В процессах межфазного взаимодействия учитывается переход от континуального режима обтекания частиц к свободномолекулярному. Описание горения частиц проводится в рамках развитой ранее полуэмпирической модели. Представлены результаты расчетов двумерных течений в плоском канале для взвесей частиц алюминия дисперсностью от 1 мкм до 100 нм. Установлено изменение характера ячеистых структур от регулярных до нерегулярных при уменьшении размера частиц. Также отмечаются рост пиковых давлений и укрупнение детонационной ячейки, что связывается с увеличением энергии активации приведенной кинетики, обусловленным переходом к кинетическому режиму горения частиц алюминия.

Ключевые слова: газовзвесь, микро- и нанодисперсные порошки алюминия, ячеистая детонация, численное моделирование.

DOI 10.15372/FGV20190509

ВВЕДЕНИЕ

Вопросы горения нанодисперсных порошков алюминия, в том числе и в детонационном режиме, привлекают большой интерес ввиду широких перспектив их использования. Детонационные явления в газовзвесах микроразмерных сферических или хлопьевидных частиц алюминия широко исследовались экспериментально, и была установлена возможность распространения детонации в спиновом режиме или режиме ячеистой детонации [1–4]. Теоретические модели детонации алюминия в воздухе, продуктах детонации газовых сред и кислороде развивались в [5–9].

Численное моделирование ячеистой детонации для взвесей сферических микроразмерных частиц проводилось в [10–12]. В [11, 12] определены зависимости размера детонационной ячейки от диаметра микроразмерных частиц. Для кислородных взвесей данные этих работ оказались очень близки, хотя расчеты были выполнены на основе различных моделей кинетики горения частиц.

В последние годы повысился интерес к ис-

следованиям в области нанодисперсных сред, в частности нанопорошков алюминия. Появилось большое число новых экспериментальных данных по воспламенению и горению субмикронных и наноразмерных частиц алюминия, обзор которых приведен в [13]. Там же обсуждаются теоретические подходы к описанию теплообмена и движения наночастиц в потоке.

Экспериментальных исследований по детонации субмикронных и наноразмерных порошков алюминия крайне мало. Можно отметить работу [4], где наблюдалась спиновая детонация в воздушной взвеси 100-нанометровых сферических частиц и частиц размером 5 мкм. Отмечены как общие свойства — близкие скорости детонации и шаг спина, так и отличительные особенности детонации наноразмерной взвеси, например значительно более высокие амплитуды пульсаций параметров течения за фронтом.

Математическое моделирование детонации в наноразмерных взвесах алюминия впервые проведено в [14]. Была разработана полуэмпирическая модель детонации, верифицированная по известным экспериментальным данным по воспламенению, горению и детонации наноразмерных частиц алюминия. В описании процессов тепловой и скоростной релаксации фаз учитывались эффекты свободномолекулярного

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проект АААА-А17-117030610139-4).

© Хмель Т. А., 2019.

взаимодействия частиц с газом, что выражается в зависимости характерного времени релаксации от числа Кнудсена. Анализ структур плоских волн пересжатой, нормальной и ослабляемой детонации показал, что в наноразмерном диапазоне частиц время горения намного (для 100 нм на порядок) превышает время скоростной и тепловой релаксации, т. е. горение протекает, по существу, в равновесной по скоростям и температурам смеси. Кроме того, особенностью детонационного горения наноразмерных частиц является сильная зависимость протяженности зоны горения от амплитуды ударной волны (УВ). Это обусловлено переходом от диффузионного режима горения, свойственного микроразмерным взвесям [7], к кинетическому режиму, характеризуемому значительно более высокой энергией активации реакции горения [13]. Указанные свойства приближают наноразмерные взвеси алюминия к газовым, в связи с чем представляет интерес, каким образом это отразится на характеристиках ячеистой детонации. Целью настоящей работы является исследование ячеистой детонации в наноразмерных газовзвесах частиц алюминия на основе численного моделирования двумерных течений.

1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕТОНАЦИИ ВЗВЕСИ НАНОЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Основные уравнения выражают законы сохранения массы, импульса и энергии для каждой фазы и каждого компонента. Система замыкается уравнениями состояния и соотношениями для процессов массообмена между компонентами (испарение, конденсация, горение), обмена импульсами (силы сопротивления) и теплообмена между газом и частицами. Двумерные течения в декартовой системе координат описываются следующими уравнениями [11]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u_i}{\partial x} + \frac{\partial \rho_i v_i}{\partial y} &= (-1)^{i-1} J, \\ \frac{\partial \rho_i u_i}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_i u_i^2 + (2-i)p]}{\partial x} + \frac{\partial \rho_i u_i v_i}{\partial y} &= \\ &= (-1)^{i-1} (-f_x + J u_2), \\ \frac{\partial \rho_i v_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_i u_i v_i)}{\partial x} + \frac{\partial [\rho_i v_i^2 + (2-i)p]}{\partial y} &= \end{aligned}$$

$$= (-1)^{i-1} (-f_y + J v_2),$$

$$\frac{\partial \rho_i E_i}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_i u_i (E_i + (2-i)p/\rho_1)]}{\partial x} + \quad (1)$$

$$+ \frac{\partial [\rho_i v_i (E_i + (2-i)p/\rho_1)]}{\partial y} =$$

$$= (-1)^{i-1} (-q - f_x u_2 - f_y v_2 + J E_2),$$

$$f_2 = \frac{\rho_2}{\tau_u} (u_1 - u_2), \quad q_2 = \frac{\rho_2 c_{v,2}}{\tau_T} (T_1 - T_2),$$

$$J_2 = \frac{\rho_2}{\tau_\xi} (\xi - \xi_k), \quad p = \rho_1 R T_1, \quad E_1 = \frac{u_1^2}{2} + c_{v,1} T_1,$$

$$E_2 = \frac{u_2^2}{2} + c_{v,2} T_2 + Q, \quad e_2 = c_{v,2} T_2 + Q.$$

Здесь индекс 1 относится к газу, 2 — к частицам, p — давление, $\rho_i = m_i \rho_{ii}$, u_i , E_i , T_i , $c_{v,i}$, m_i — соответственно средняя плотность, скорость, полная энергия на единицу массы, температура, теплоемкость и объемная концентрация компонента, ρ_{ii} — истинная плотность, R — приведенная газовая постоянная, Q — тепловой эффект реакции горения частиц в рамках приведенной кинетики. Межфазное взаимодействие выражается параметрами J_2 (массообмен), f_2 (сила межфазного взаимодействия), q_2 (теплообмен фаз). Отметим, что для расчетов двумерных течений принят обоснованный в [15] упрощенный подход, при котором тепловыделение химической реакции определяется с учетом теплоты плавления и испарения без выделения этих процессов в отдельные стадии, как и в [11].

Процессы скоростной релаксации и теплообмена в газовзвесах наноразмерных частиц характеризуются переходом от континуального к свободномолекулярному режиму взаимодействия частицы с молекулами газа. Учет свободномолекулярных эффектов (СМЭ) в модели [14] основан на известных из литературы данных, в частности из приведенных в [13]. Силы сопротивления в потоке газа частиц, размер которых сравним со средней длиной свободного пробега молекул газа, определяются с учетом поправочного коэффициента Каннингема [13]:

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

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

Здесь $\text{Kn} = RT_1/(\sqrt{2}\pi d_g^2 N_A p d_2)$ — число Кнудсена, d_2 , ρ_{22} — диаметр и собственная плотность частиц, d_g , m_g — размер и масса молекулы окружающего газа, N_A — число Авогадро. Коэффициент сопротивления c_D определяется так же, как для микроразмерных частиц, с учетом сверхзвукового обтекания в детонационной структуре (см. [11]) по формуле

$$c_D(\text{Re}, M_{12}) = \left[1 + \exp\left(-\frac{0.43}{M_{12}^{4.67}}\right) \right] \times \left(0.38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}} \right), \quad (3)$$

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

где M — число Маха, μ_1 — динамическая вязкость газа, γ_1 — показатель адиабаты.

Теплообмен между газом и субмикронными и наноразмерными частицами определяется соответственно изменению режима обтекания частиц с континуального при $\text{Kn} < 0.01$ к свободномолекулярному при $\text{Kn} > 10$ [13]. Представления для характерных времен тепловой релаксации в указанных режимах имеют различный вид:

$$\tau_T^{\text{cont}} = \frac{d^2 \rho_{22} c_{v2}}{6 \lambda_1 \text{Nu}}, \quad \text{Nu} = 2 + 0.6 \text{Re}^{1/2} \text{Pr}^{1/3},$$

$$\tau_T^{\text{fm}} = \frac{d \rho_{22} c_{v2}}{6 \alpha p} \sqrt{\frac{8 \pi m_g T_1}{k_B}} \left(\frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \right). \quad (4)$$

Здесь c_{v2} — теплоемкость частиц, Nu , Pr — числа Нуссельта и Прандтля (обычно принимается $\text{Pr} = 0.7$), λ_1 — теплопроводность газа, k_B — константа Больцмана, α — аккомодационный коэффициент. В диапазоне размеров частиц $10 \text{ нм} \div 1 \text{ мкм}$ число Кнудсена меняется от порядка 10^{-2} до порядка 10 соответственно, режим обтекания является переходным. Для определения характерного времени теплообмена в этой области используется логарифмическая интерполяция [14]:

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

Описание воспламенения и горения наноразмерных частиц алюминия в условиях детонации приведено в [14] и основано на анализе известных эмпирических данных. Согласно

экспериментальным результатам [13], воспламенение нанометровых частиц даже в статических условиях происходит при температурах, близких к температуре плавления алюминия. Для условий за ударными волнами, как и в [14], принимается температурный критерий воспламенения $T_{\text{ign}} = T_{\text{melt}} = 930 \text{ К}$.

Горение частиц описывается в рамках приведенной кинетики с константами, определенными на основе известных экспериментальных данных по зависимости времени горения частицы от ее диаметра, а также давления, температуры и содержания окислителя в окружающем газе [14]. Для условий избытка окислителя (включая стехиометрический состав) соответствующая формула имеет вид

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

Значения констант для нанометрового диапазона частиц $50 \leq d_0 \leq 135 \text{ нм}$ определены в [14]: $d_0 = 80 \text{ нм}$, $p_* = 8 \text{ атм}$; $E_a = E_{an} = 60 \text{ кДж/моль}$, $m = 0.5$, $\tau_0 = 0.25 \text{ мкс}$. Для частиц микронного размера в [16] принята аналогичная формула с $m = 0$, $E_a = E_{am} = 32 \text{ кДж/моль}$, $d_0 = 3.5 \text{ мкм}$, $\tau_0 = 0.294 \text{ мкс}$. Для субмикронного диапазона размеров частиц $135 \text{ нм} \leq d_0 \leq 1 \text{ мкм}$ выбрана следующая интерполяционная зависимость для m и E_a :

$$m = -0.25 \ln(d/d_1), \quad (7)$$

$$E_a = E_{am} [1 + 0.5 \ln(d/d_1)] - 0.5 E_{an} \ln(d/d_1),$$

обеспечивающая при $\tau_0 = 0.2 \text{ мкс}$, $p_* = 17 \text{ атм}$, $d_1 = 1 \text{ мкм}$ плавное сопряжение характеристик горения микронных и наноразмерных частиц.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Начально-краевая задача формулируется как иницирование детонации при вхождении сильной ударной волны в облако газозвеси, заполняющей всю ширину плоского канала с некоторым возмущением плотности на кромке [11]. Для численных расчетов применялась тестированная ранее схема Хартена TVD для газа и Джентри — Мартина — Дэйли для частиц [17]. Шаг сетки определялся соответственно масштабам зон релаксации и зависел от размера частиц. Проводились тестовые расчеты с варьированием шага сетки и с учетом и без учета свободномолекулярных эффектов (поправок Каннингема и числа Кнудсена в процессах теплообмена). На рис. 1 приведены поля

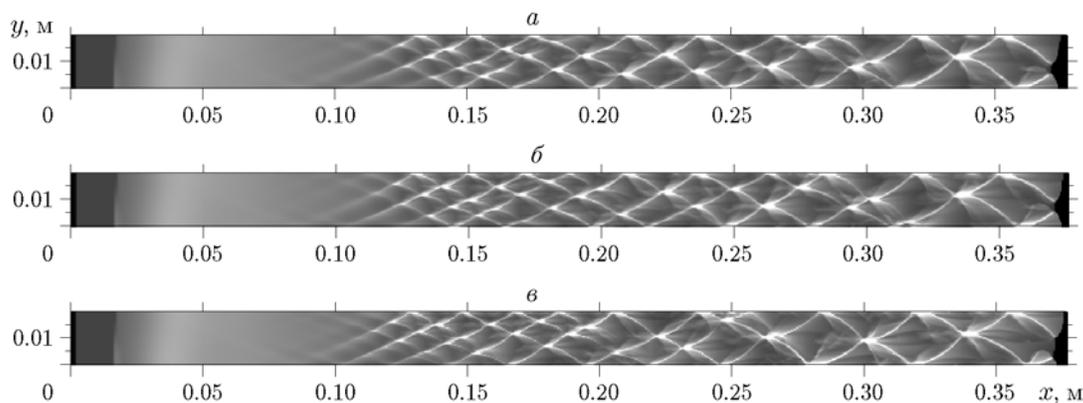


Рис. 1. Результаты тестовых расчетов при $d = 300$ нм без учета (a , $б$) и с учетом ($в$) свободно-молекулярных эффектов:

$\Delta x = \Delta y = 0.0001$ (a), 0.000075 ($б$), 0.00005 м ($в$)

истории максимального давления, полученные на разных сетках при $d = 300$ нм, $E_a = E_{an}$, $m = 0.5$, $\tau_0 = 0.5$ мкс без учета (рис. 1, $a, б$) и с учетом (рис. 1, $в$) свободномолекулярных эффектов. Отметим, что все картины на рис. 1–5 построены в единой теневой шкале. Как видно из рис. 1, при варьировании шага сетки результаты совпадают как по положению и форме лидирующего фронта, так и по установившимся картинам расположения и движения поперечных волн. Так же, как и для структур плоских волн [14], эффекты свободномолекулярного режима обтекания и теплообмена незначительны для газозвесей с размером частиц более 300 нм.

3. ФОРМИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОЗВЕСЯХ МИКРОННЫХ И СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ

Детальное исследование ячеистой детонации в микродисперсных газозвесях алюминия представлено в [11], где определены основные характеристики и характерные размеры детонационных ячеек для стехиометрических взвесей в кислороде. Установлена степенная зависимость размера ячейки от диаметра частиц с показателем 1.6. В работах [12, 18] представлены аналогичные зависимости размера ячейки от диаметра частиц для воздушных взвесей алюминия, где определено близкое к полученному в [11] значение показателя степени 1.4. В [18] моделирование детонации проводилось в рамках кинетики [7], основанной на описании горения частиц в диффузионном режиме. В [12] использовалась модель гибридной кинетики, включа-

ющая, кроме реакции диффузионного горения, описание низкотемпературного окисления с использованием уравнения аррениусовского типа. Проведенное в [12] сравнение показало, что размеры детонационных ячеек определяются в рамках обеих моделей практически равными. Однако отметим, что и в [11], и в [12, 18] зависимость времени горения частицы от ее диаметра определялась как $\tau \sim d^2$, что не согласуется с последними данными по горению мелких частиц алюминия, приведенных в [13] и свидетельствующих о наличии переходного режима горения мелких микронных и субмикронных частиц от диффузионного к кинетическому. При этом свойства кинетического режима горения частично учитывались в [11, 12] в аррениусовской реакции приведенной кинетики.

В настоящей работе расчеты для взвесей микронных частиц диаметром менее 3.5 мкм проведены с использованием уточненной модели детонационного горения алюминия (6). В предэкспоненте аррениусовской реакции показатель степени в зависимости характерного времени горения от диаметра частицы принят равным 0.3 [13]. Для частиц размером менее 1 мкм (субмикронных) приняты условия переходного режима, значения энергии активации E_a и степенного показателя m в зависимости времени горения от давления определяются по формуле (7).

На рис. 2 приведены примеры расчетов ячеистой детонации частиц размером 1 мкм для обедненной смеси (при избытке окислителя) и для случая стехиометрической концентрации частиц. Можно отметить, что умень-

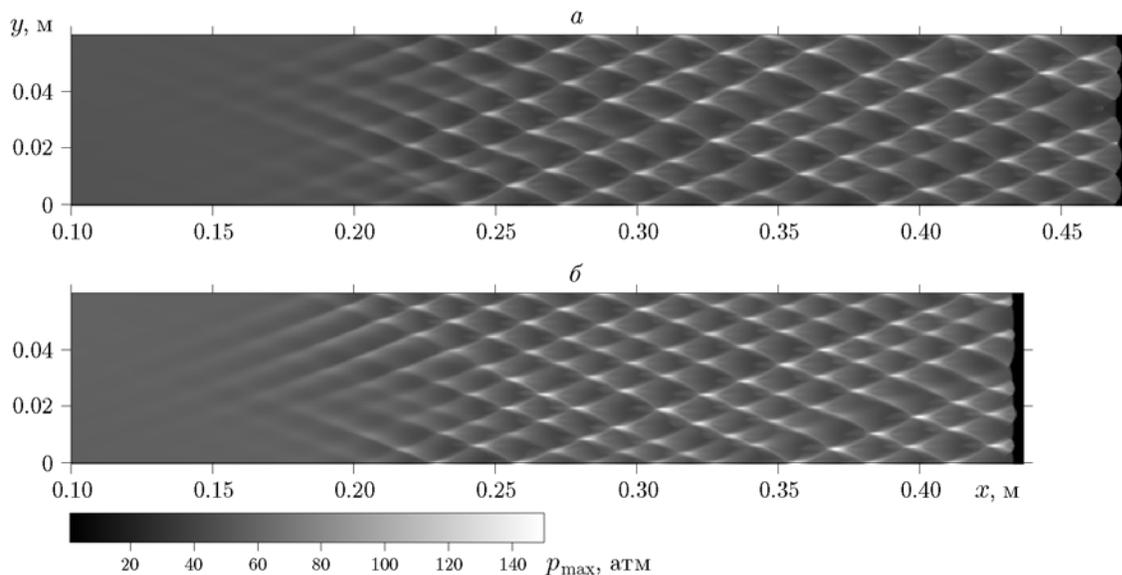


Рис. 2. Ячеистая детонация в газовзвесах частиц алюминия размером 1 мкм: $\xi_0 = 0.4$ (а), 0.55 (б)

шение начальной загрузки частиц практически не отражается на характеристиках ячеистой детонации: пиковом давлении, размере ячейки. Средняя скорость распространения фронта составляет 1.68 км/с при $\xi_0 = 0.4$ и 1.57 км/с при $\xi_0 = 0.55$, что чуть меньше предсказанной в теории Чепмена — Жуге и термодинамических расчетах [18] (1.7 и 1.6 км/с).

Характеристики ячеистой детонации взвесей с размером частиц 1 мкм аналогичны описанным в работе [11], за исключением чуть большего размера регулярной ячейки, чем было предсказано в рамках кинетики с квадратичной зависимостью времени горения от диаметра. Как и в [11], пиковые давления при столкновении тройных точек ячеистой детонации составляют около 150 атм, что почти вдвое превышает давление в точке химпика волн Чепмена — Жуге. Траектории тройных точек близки к прямым линиям. В микроразмерных взвесах значительная доля периода горения соответствует условиям скоростной и температурной неравновесности фаз [8, 11], что является сглаживающим фактором формирования профиля давления за фронтом лидирующей ударной волны. Это обуславливает, как и в [11], размазанность следов тройных точек (см. рис. 2). Аналогичный характер траекторий и еще более высокая степень их размытости с удвоением линий (вследствие немонотонности поведения параметров в зоне скоростной,

тепловой и химической релаксации) получены также в расчетах [12, 18] ячеистой детонации воздушных взвесей более крупных частиц (8.6 и 13.5 мкм).

Картины ячеистой детонации субмикронных взвесей представлены на рис. 3 для частиц размером 600 нм (стехиометрический состав). Пиковое давление здесь значительно выше и составляет 220 атм. Также можно заметить несколько большую четкость траекторий тройных точек, что приближает картины ячеистой детонации к аналогичным картинам в газах.

Объяснение этому состоит в том, что с переходом в субмикронную область размеров частиц влияние процессов релаксации на горение снижается. Характерное время скоростной и тепловой релаксации уменьшается пропорционально d^α , где $1.5 < \alpha < 2$, а время горения, согласно данным, приведенным в [13], сокращается пропорционально $d^{0.3}$. Таким образом, в субмикронных и наноразмерных взвесах частиц алюминия распространение детонации характеризуется горением в условиях скоростного и теплового равновесия фаз, что приближает характеристики ячеистой детонации газовзвесей к детонации газовых смесей.

Вторым фактором, обуславливающим увеличение пикового давления, является изменение кинетики горения частиц алюминия с переходом от диффузионно-лимитированной ре-

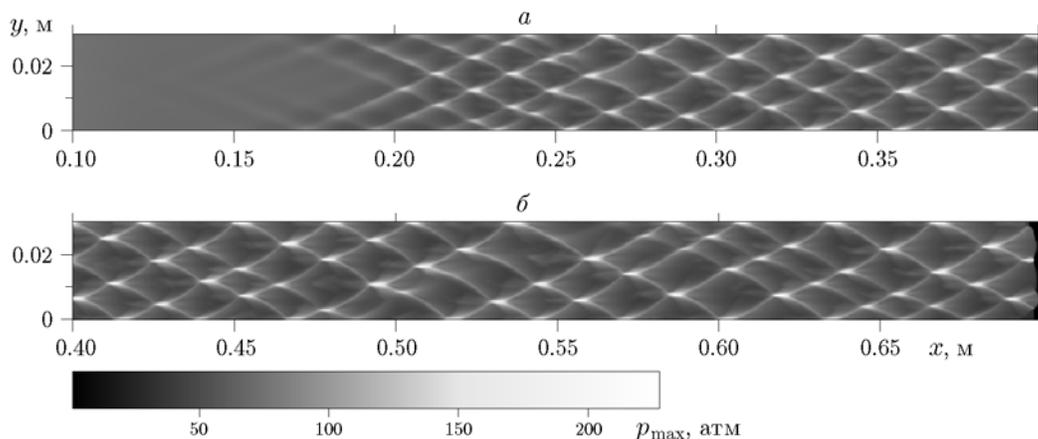


Рис. 3. Ячеистая детонация в субмикронной взвеси: размер частиц 600 нм, ширина канала 3 см, $\xi_0 = 0.55$

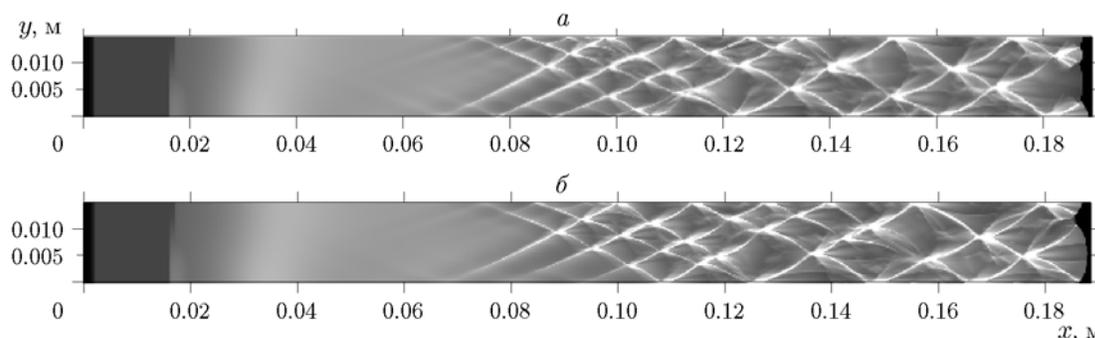


Рис. 4. Формирование ячеистой детонации в нанодисперсных взвесьях в канале шириной 1.5 см: размер частиц 80 (а), 100 нм (б)

акции горения к кинетическому режиму [13]. Наиболее ярко это проявляется в расчетах детонации газозвесей частиц дисперсностью менее 500 нм.

4. ОСОБЕННОСТИ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОЗВЕСЯХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ

Результаты расчетов ячеистой детонации взвесей частиц размером $80 \div 200$ нм представлены на рис. 4–8. Здесь горение частиц является полностью равновесным по температуре и скорости и характеризуется более высокой энергией активации приведенной аррениусовской кинетики, учтенной в модели [14] в соответствии с экспериментальными данными [13, 19]. Как показано в [14], масштаб колебаний длины зоны реакции пересжатых и ослабляемых волн значительно выше, чем в детонации микронных взвесей, что и обуславливает отличия в картинах ячеистой детонации. На карти-

нах следов тройных точек видно, что их траектории являются еще более четкими, чем в микроразмерных взвесьях. Как показывает сравнение рис. 2, 3 и рис. 6, 7, в переходном режиме горения траектории тройных точек ближе к прямым линиям, а в кинетическом режиме дугообразные, что свойственно газовой ячеистой детонации.

При развитии ячеистой детонации из малых возмущений первоначально формируется некоторое количество поперечных волн, расстояние между которыми соответствует акустической теории [11, 20]. В микроразмерных взвесьях по мере распространения и усиления поперечных волн размер ячейки меняется незначительно [11]. В нанодисперсной взвеси происходит существенная перестройка поперечных волн и заметное укрупнение ячейки, что можно видеть как в узких каналах (рис. 1, 4, 5), так и в достаточно широких (рис. 6, 7). Например, на всех фрагментах

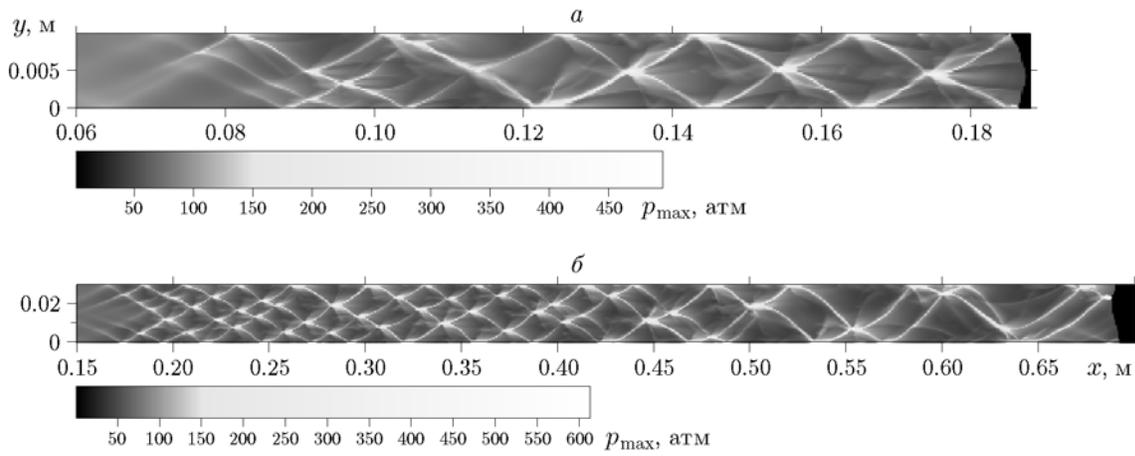


Рис. 5. Распространение детонации в узких каналах:
a — размер частиц 200 нм, ширина канала 1 см, *б* — размер частиц 150 нм, ширина канала 3 см

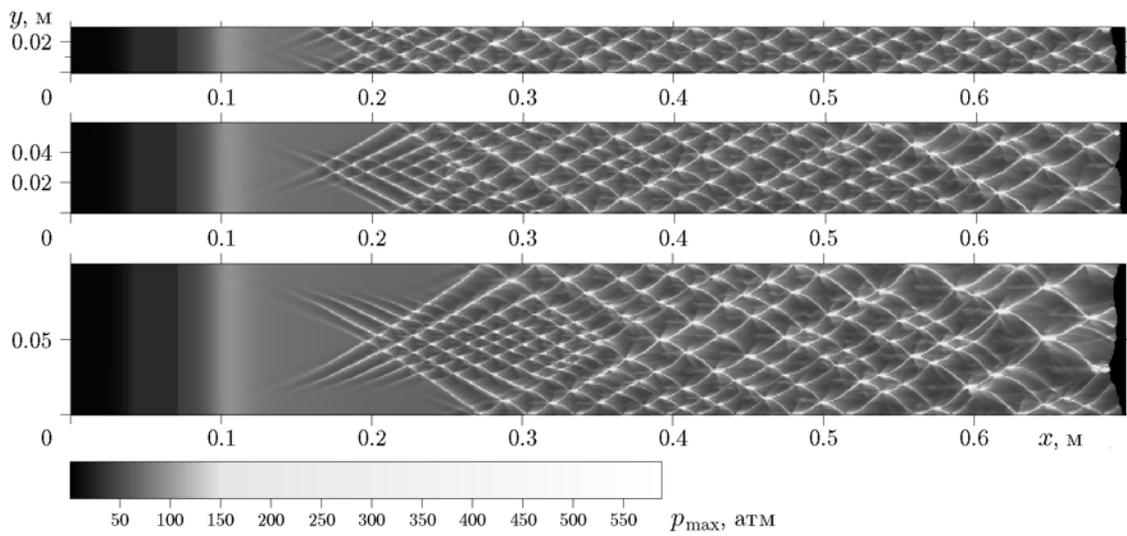


Рис. 6. Распространение детонации в смеси частиц размером 200 нм в каналах разной ширины

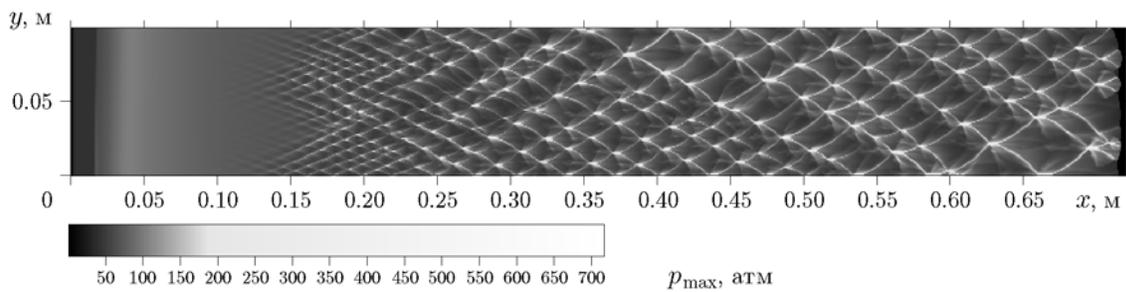


Рис. 7. Перестройка поперечных волн при распространении ячеистой детонации:
 ширина канала 10 см, размер частиц 150 нм

рис. 1 из пяти изначально сформированных поперечных волн остаются две, формирующие под влиянием стенок канала одну несимметричную ячейку, а на рис. 4 — из пяти-семи поперечных волн остаются три, формирующие полторы ячейки в канале.

В широких каналах перестройка поперечных волн проявляется в еще большей степени. На рис. 6, 7 видно многократное увеличение размера ячейки по мере распространения детонации, кроме того, количество поперечных волн и, соответственно, ячеек в канале меняется. Таким образом, характер ячейистой детонации нанодисперсных взвесей можно считать слаборегулярным или нерегулярным.

Отметим, что максимальное давление при столкновении тройных точек в несколько раз выше, чем в ячейистой детонации микродисперсных частиц. Например, в узлах на рис. 1 давление достигает 510 атм, на рис. 4 — 570 атм, а в широких каналах по мере укрупнения ячейки может быть порядка $600 \div 700$ атм (см. рис. 6, 7). Этот результат качественно согласуется с данными экспериментальных наблюдений спиновой детонации воздушных взвесей алюминия [4], где измерение давления показало значительное увеличение амплитуды пульсаций при использовании порошка с размером частиц 100 нм в сравнении с аналогичной взвесью частиц со средним размером 1.6 мкм.

Мгновенные картины течения ячейистой детонации в смеси частиц размером 100 нм показаны на рис. 8. Здесь также можно отметить более четкие картины ударно-волновых фронтов и более высокие пиковые значения параметров, чем в микродисперсных смесях. Например, в приведенных в [11] картинах плотности газа максимальное значение составило 14 кг/м^3 , а на рис. 8, б — втрое выше. В картинах давления, приведенных для монодисперсной взвеси частиц размером 2 мкм в [21] максимальное значение составило 120 атм, а на рис. 8, а при аналогичной конфигурации участков пересажатых и ослабляемых волн — 240 атм. В целом же ячейистая детонация микродисперсных и нанодисперсных взвесей характеризуется общим характером картин течения, полей давления, плотности, вихревых структур и распределений температуры, за исключением более искривленных траекторий фронтов поперечных волн в газовзвесьях наноразмерных частиц и отмеченного выше увеличения амплитуды колебаний гидродинамических параметров.

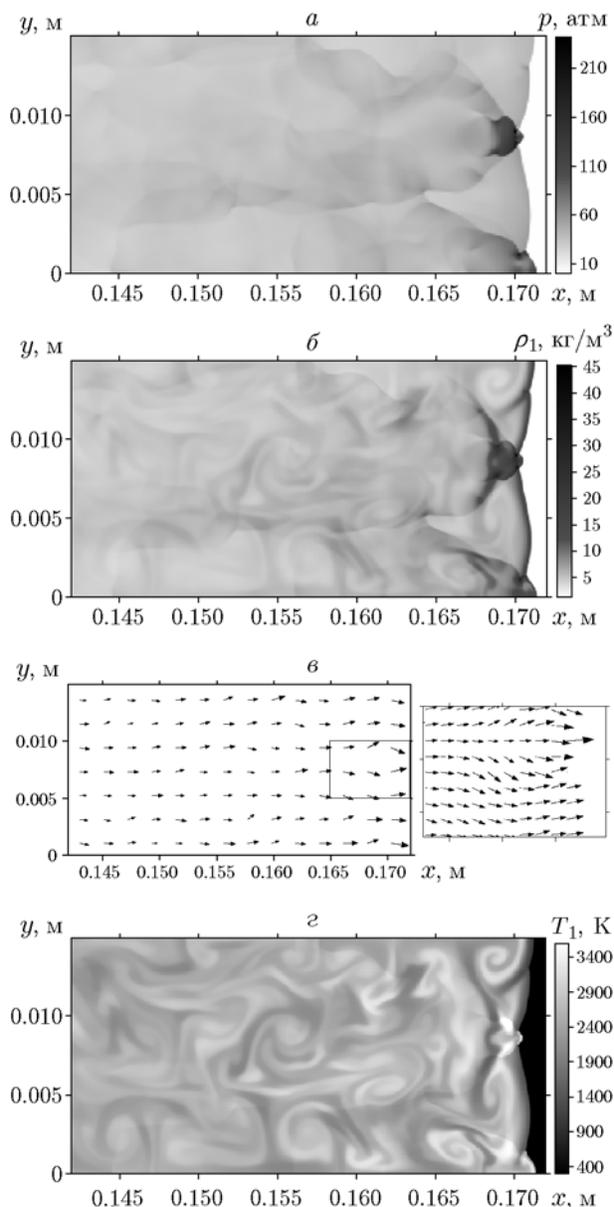


Рис. 8. Мгновенные картины течения ячейистой детонации:

момент времени 0.09 мс, ширина канала 1.5 см, размер частиц 100 нм; а — давление, б — плотность газа, в — поле скоростей, г — поле температур

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами численного моделирования двумерных течений в рамках механики гетерогенных сред исследуется ячейистая детонация в монодисперсных взвесьях субмикронных и наноразмерных частиц алюминия стехиометрического состава в кислороде.

Описание процессов скоростной и тепловой релаксации нанодисперсной среды с газовой фазой проводится с учетом перехода от континуального режима обтекания частиц к свободномолекулярному. Для описания горения частиц алюминия нанометрового диапазона размеров используется развитая ранее полумпирическая модель приведенной кинетики, построенная с использованием совокупности экспериментальных данных. Учитываются переходный характер режима горения частиц от диффузионного к кинетическому с показателем 0.3 в степенной зависимости характерного времени горения от диаметра частицы и увеличение энергии активации с уменьшением размера частиц.

Постановка задачи соответствует задаче ударно-волнового инициирования детонации в облаке частиц в плоском канале с развитием поперечных волн из малых возмущений.

Отличительным свойством ячеистой детонации нанодисперсных взвесей является существенная перестройка поперечных волн по мере развития возмущений, сопровождаемая уменьшением количества поперечных волн, увеличением размера ячейки и ростом пиковых значений параметров детонации.

В развитой ячеистой детонации нанодисперсных взвесей траектории фронтов поперечных волн являются более искривленными, как и траектории тройных точек в картинах истории максимального давления. При этом по мгновенным картинам течения ячеистая детонация микродисперсных и нанодисперсных взвесей характеризуется качественным сходством полей давления, плотности, вихревой структуры и распределений температуры.

При уменьшении размеров частиц в субмикронном и нанометровом диапазонах отмечается увеличение амплитуды колебаний гидродинамических параметров, в частности рост пикового давления ячеистой детонации, что согласуется с данными экспериментов [4]. Также наблюдается существенное укрупнение детонационной ячейки и изменение характера ячеистых структур от регулярных для микронных и субмикронных размеров до нерегулярных для размеров частиц $80 \div 200$ нм. Объяснение этих особенностей связывается с увеличением энергии активации приведенной кинетики при переходе к кинетическому режиму горения алюминия.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Strauss W. A.** Investigation of the detonation of aluminum powder-oxygen mixtures // *AIAA J.* — 1968. — V. 6, N 12. — P. 1753–1761.
2. **Tulis A. J., Selman J. R.** Detonation tube studies of aluminum particles dispersed in air // *Proc. of the 19th Int. Symp. on Combustion.* — Pittsburgh, PA: Combustion Inst., 1982. — P. 655–663.
3. **Ingnoli W., Veysiere B., Khasainov B. A.** Study of detonation initiation in unconfined aluminum dust clouds // *Gaseous and Heterogeneous Detonations, Science to Applications / G. Roy et al. (Eds).* — M.: ENAS Publ., 1999. — P. 337–350.
4. **Zhang F., Murray S. B., Gerrard R. B.** Aluminum particle-air detonation at elevated pressures // *Shock Waves.* — 2006. — V. 15. — P. 313–324.
5. **Федоров А. В.** Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // *Физика горения и взрыва.* — 1992. — Т. 28, № 3. — С. 72–83.
6. **Борисов А. А., Хасайнов Б. А., Вейссьер Б. и др.** О детонации взвесей алюминия в воздухе и кислороде // *Хим. физика.* — 1991. — Т. 10, № 2. — С. 250–272.
7. **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, N 1, 2. — P. 241–253.
8. **Fedorov A. V., Khmel T. A., Fomin V. M.** Non-equilibrium model of steady detonations in aluminum particles — oxygen suspensions // *Shock Waves.* — 1999. — V. 9, N 5. — P. 313–318.
9. **Zhang F., Gerrard R. B., Ripley R. C.** Reaction mechanism of aluminum-particle-air detonation // *J. Propul. Power.* — 2009. — V. 25. — P. 845–858.
10. **Benkiewicz K., Hayashi A. K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // *Shock Waves.* — 2003. — V. 13. — P. 385–402.
11. **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.
12. **Briand A., Veysiere B., Khasainov B. A.** Modelling of detonation cellular structure in aluminum suspensions // *Shock Waves.* — 2010. — V. 20. — P. 521–529.
13. **Сандарам Д., Янг В., Зарко В. Е.** Горение наночастиц алюминия (обзор) // *Физика горения и взрыва.* — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 37–63.
14. **Хмель Т. А., Федоров А. В.** Моделирование плоских волн детонации в газозвеси наноразмерных частиц алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2018. — Т. 54, № 2. — С. 71–81.

15. **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.
16. **Федоров А. В., Хмель Т. А., Лаврук С. А.** Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. II. Критические условия распространения // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 1. — С. 81–90.
17. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Численные технологии исследования гетерогенной детонации газовзвесей // Мат. моделирование. — 2006. — Т. 18, № 8. — С. 49–63.
18. **Veysiere B., Khasainov B. A., Briand A.** Investigation of detonation initiation in aluminum suspensions // Shock Waves. — 2008. — V. 18. — P. 307–315.
19. **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.
20. **Barthel H. O.** Predicted spacings in hydrogen-oxygen-argon detonations // Phys. Fluids. — 1974. — V. 17, N 8. — P. 1547–1553.
21. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Формирование и вырождение ячеистой детонации в бидисперсных газовзвесах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 109–120.

Поступила в редакцию 10.05.2018.

После доработки 05.06.2018.

Принята к публикации 11.07.2018.
