

УДК 532.529+541.126

ХАРАКТЕРИСТИКИ И КРИТЕРИИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ВЗВЕСЕЙ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ В ДЕТОНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ

А. В. Фёдоров, Т. А. Хмель

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

Представлена физико-математическая модель воспламенения взвесей частиц алюминия в динамических условиях с учетом плавления, реакции низкотемпературного окисления алюминия и полиморфных превращений оксидной пленки. Модель верифицирована по экспериментальным данным по предельным температурам и временам задержки воспламенения взвесей алюминия в ударных и детонационных волнах. На основе анализа тепловой динамики смеси показана применимость приведенных моделей (исключающих плавление и предпламенное окисление) при адекватном температурном критерии, обеспечивающем такие же задержки воспламенения. Определены зависимости введенной температуры воспламенения от параметров ударной волны, размера и концентрации частиц, содержания окислителя. Даны формулы для инвариантного по концентрациям критерия, выражающие зависимость температуры воспламенения от текущей температуры газа. Для воздушных и кислородных взвесей найдены определяющие константы.

Ключевые слова: газозвеси, алюминий, воспламенение, ударные волны, детонация.

ВВЕДЕНИЕ

Анализ взрывных и детонационных процессов в пылевзвесах алюминия представляет интерес как в отношении взрыво- и пожаробезопасности, так и в плане перспектив использования мелко- и ультрадисперсных алюминиевых порошков в детонационных двигателях.

Физико-математическое и численное моделирование ударно-волновых и детонационных процессов в газозвесах частиц алюминия основывается на подходах механики гетерогенных сред, а описание химических реакций часто проводится в рамках уравнений приведенной кинетики [1–15]. Для анализа возбуждения и распространения детонации необходимо адекватное описание критических условий воспламенения частиц. Процессы, протекающие на стадии воспламенения взвеси, оказывают влияние на срыв и инициирование детонации, ячеистые структуры, характеристики распространения в открытых и замкнутых объемах (в том числе и в каналах технических устройств),

прохождение детонационных волн через препятствия и т. д.

В работах [1, 2] развита физико-математическая модель воспламенения и горения газозвесей частиц металлов при различных условиях, включая детонационные процессы. Обсуждаются три механизма воспламенения частиц алюминия в динамических условиях за ударными и детонационными волнами: «тепловой взрыв», достижение критической температуры и дробление частиц. Применение модели [2] к исследованию гетерогенной детонации кислородных взвесей частиц алюминия в [3–10] основано на принятии температурного критерия воспламенения, как и в ряде работ других авторов по гетерогенной и гибридной детонации газозвесей алюминия [11–13]. Исключение из рассмотрения реакции предпламенного окисления и плавления частиц является удобным и распространенным подходом при численном моделировании многомерных детонационных течений в газозвесах (в том числе и полидисперсных) [3–13]. При этом температура воспламенения принималась различной — от 900 К в [3–10] и 950 К в [12] до 1350 К в [12, 13] и 1700 К в [11]. Выбор значения 900 К (ниже точки плавления алюминия 933 К) позволил авторам работ [3–10] упростить модель, объединив стадию плавления частицы со стадией гетерогенного горения. В [8] выполнены расчеты при варьировании температуры воспламе-

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН «Фундаментальные проблемы горения и детонации в энергетике», Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 11-08-00144-а) и АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (код проекта 2.1.1/11336).

нения, чтобы определить влияние этого параметра на размер детонационной ячейки. Показано, что увеличение T_{ign} до 1200 К в расчетах ячейистой детонации слабо сказывается на масштабах формирующихся ячейистых структур.

В [14] предложена некоторая модель гибридной кинетики, сочетающей две реакции — для стадии воспламенения и стадии гетерогенного горения. В модели предусмотрен автоматический постепенный переход от одной стадии к другой, однако полагалось, что на обеих стадиях тепловыделение происходит в газовую фазу.

Анализ задач воспламенения взвесей алюминия в ударных волнах проведен в работах [15, 16] на основе математической модели с учетом эмпирического уравнения нарастания толщины оксидной пленки [17] и без учета плавления частиц. Установлено определенное соответствие экспериментальных и теоретических данных. В [18] исследовались процессы воспламенения и горения частиц алюминия за ударными и детонационными волнами на основе физико-математической модели, в которой учитывались как предпламенное окисление, так и плавление частиц. При решении задачи воспламенения частиц в волнах газовой детонации срыв теплового равновесия не был получен, поэтому переход к режиму горения частицы связали с достижением частицей температуры плавления оксидной пленки 2300 К, что не согласуется с общепринятыми критериями воспламенения гибридной и гетерогенной детонации взвесей алюминия в [11, 12]. Сопоставление с результатами измерения [19] времен задержки воспламенения газозвеси алюминия со средним диаметром частиц порядка 10 мкм также показало значительное превышение полученных в [18] расчетных значений (100 ÷ 200 мкс) над экспериментальными данными (20 ÷ 40 мкс).

При исследовании переходных процессов при распространении детонационных волн (дифракция на угловых конфигурациях, срыв и реиницирование в поперечных волнах и т. д.) в рамках предельных моделей, игнорирующих плавление и предпламенное окисление, выбор критерия воспламенения должен быть обоснован, так как критическая температура может зависеть от параметров взвеси и динамических характеристик.

В настоящей работе теоретически и численно исследуется динамика нагрева и воспла-

менения газозвеси частиц алюминия в ударных и детонационных волнах с учетом плавления частиц (основываясь частично на воззрениях [18] на стадию плавления), реакции низкотемпературного окисления и полиморфных трансформаций оксида [20]. Воспламенение частиц в полной модели обусловлено срывом теплового равновесия. Одновременно в работе проводится анализ тепловой динамики смеси в рамках предельной модели без учета плавления и реакций на стадии воспламенения. Адекватная температура воспламенения в предельной модели определяется из соответствия периодов задержки воспламенения, рассчитанных по предельной модели и в задаче о срыве теплового равновесия. Целью работы является анализ факторов, влияющих на срыв теплового равновесия дискретной фазы, и определение зависимости адекватной для предельных моделей температуры воспламенения частиц от начальных и текущих параметров взвеси в динамических условиях.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу о воспламенении взвеси частиц алюминия в высокотемпературном потоке за стационарной ударной (детонационной) волной. Напомним некоторые известные представления о строении частицы алюминия. Частица алюминия покрыта оксидной пленкой, масса которой не превышает 2 % массы частицы. В нормальных условиях (при температуре ≈ 300 К) пленка представляет собой аморфный оксид Al_2O_3 . При нагреве (достижении частицей температуры порядка 770 ÷ 870 К) аморфный оксид трансформируется в кристаллический, при этом защитные свойства оксидной пленки значительно снижаются [20, 21]. Кроме того, становится возможным нарушение целостности оксидной пленки при быстром нагреве, в силу трехкратного различия коэффициентов линейного расширения алюминия и оксида алюминия [22]. Таким образом, на поверхности частицы появляются участки, не покрытые оксидом, что способствует иницированию реакции окисления алюминия.

Для описания стадии воспламенения примем следующие естественные предположения: частица состоит из алюминиевого ядра и оксида алюминия, физические свойства аморфного и кристаллического оксида одинаковы, распределение температуры по частице однородно. На стадии воспламенения реакция окисле-

ния протекает с образованием твердого оксида непосредственно на поверхности частицы, поэтому тепло этой реакции расходуется на нагрев и плавление частицы. В процессе плавления температура частицы сохраняется постоянной, температура плавления считается не зависящей от давления. (Более детально модель неравновесного плавления/кристаллизации частиц металла представлена, например, в [23], анализ ударно-волновой структуры в взрывзвеси плавящихся частиц проведен в [24]).

Задача тепловой динамики частицы алюминия с учетом трансформации аморфного оксида в кристаллический при нагреве в статических условиях детально исследована в работе [20]. Окисление алюминия описывалось уравнениями аррениусовского типа первого порядка по толщине оксидной пленки на части поверхности, покрытой кристаллическим оксидом, и нулевого порядка на остальной поверхности. Кинетика образования кристаллического оксида считалась связанной с кинетикой окисления алюминия. Константы реакций взяты из [20, 25], где они определены из эмпирических данных по зависимостям предельных температур и времен задержки воспламенения от размера частиц. Аррениусовский закон окисления алюминия на стадии воспламенения был принят также в работе [16], где предэкспонент химической реакции представлен как функция температуры окружающей среды и предельной температуры. Для условий статического нагрева одиночной частицы получено удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных по двум зависимостям — времени задержки воспламенения от размера частицы и времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды. В настоящей работе используются некоторые положения моделей [2, 20, 25] с описанием стадии плавления в соответствии с [18].

Уравнения, описывающие параметры газозвези в стационарной плоской ударной или детонационной волне, вытекают из законов сохранения масс компонентов, а также из уравнений импульса и энергии каждой из фаз, записанных в связанной с фронтом системе координат [1, 2]. Систему замыкают уравнения состояния с учетом плавления и законами межфазного взаимодействия:

$$\frac{d\rho_1 u_1}{dx} = -\frac{J\bar{v}_{11}}{\bar{v}_{21}}, \quad \frac{d\rho_{21} u_2}{dx} = -J,$$

$$\frac{d\rho_{22} u_2}{dx} = \frac{J\bar{v}_{22}}{\bar{v}_{21}}, \quad \frac{d[\rho_1 u_1^2 + p]}{dx} = -f - \frac{J u_2 \bar{v}_{11}}{\bar{v}_{21}},$$

$$\frac{d\rho_2 u_2^2}{dx} = f + \frac{J u_2 \bar{v}_{11}}{\bar{v}_{21}},$$

$$\frac{d[\rho_1 u_1 (E_1 + p/\rho_1) + \rho_2 u_2 E_2]}{dx} = 0,$$

$$p = \rho_1 R T_1, \quad E_1 = u_1^2/2 + c_{v,1} T_1, \quad (1)$$

$$\rho_2 E_2 =$$

$$= \rho_2 u_2^2/2 + (c_{21} \rho_{21} + c_{22} \rho_{22}) T_2 + (Q + Q_m \varphi) \rho_{21},$$

$$f = \frac{3m_2 \rho_{11}}{4d} c_D |u_1 - u_2| (u_1 - u_2),$$

$$q = \frac{6m_2 \lambda_1}{d^2} \text{Nu} (T_1 - T_2).$$

Здесь $\bar{v}_{22} = \bar{v}_{11} + \bar{v}_{21}$ — приведенные стехиометрические коэффициенты; p — давление; ρ_i , u_i , E_i — средняя плотность, скорость и полная энергия на единицу массы i -й фазы ($i = 1, 2$); $\rho_1 = m_1 \rho_{1,0}$, m_i — объемная концентрация, $\rho_{ij,0}$ — истинные плотности фаз; J — приток массы; $\rho_{2j} = m_2 \rho_{2j,0}$, $j = 1, 2$; T_1 , T_2 — температуры газа и частиц; Q , Q_m — тепловой эффект химической реакции и теплота плавления; $c_{v,1}$, c_{21} , c_{22} — теплоемкости газа, алюминия и оксида алюминия; индекс 1 относится к газу, 2 — к частицам, 21 — к алюминию, 22 — к оксиду алюминия.

Уравнения для динамики нагрева частиц и изменения доли расплавленного металла φ имеют вид [18, 20]

$$(c_{21} \rho_{21} + c_{22} \rho_{22}) \frac{dT_2 u_2}{dx} = J(Q + \varphi Q_m) + q \quad \text{при } T_2 \neq T_m, \quad (2)$$

$$\frac{dT_2 u_2}{dx} = 0, \quad \frac{d(\varphi u_2)}{dx} = \frac{(Q + \varphi Q_m) J + q}{\rho_{21} Q_m}$$

$$\text{при } T_2 = T_m.$$

Уравнения для массообмена принимаются вместе с константами согласно модели воспламенения [20, 25]:

$$J = 6\rho_1 \rho_2 \left[\sigma k_* \exp\left(-\frac{E_k}{RT_2}\right) + \right.$$

$$+ (1 - \sigma) \frac{D_*}{h} \exp\left(-\frac{E_D}{RT_2}\right) \frac{C_{ox}}{\rho_{2,0}},$$

$$\frac{d(\sigma u_2)}{dx} = -\rho_1 u_2 \sigma \sigma_* C_{ox} \exp\left(-\frac{E_k}{RT_2}\right), \quad (3)$$

$$\frac{d(hu_2)}{dx} = \rho_1 \frac{D_*}{\beta \rho_{22,0} h} C_{ox} \exp\left(-\frac{E_D}{RT_2}\right),$$

$$\beta = \frac{2\mu_{Al_2O_3}}{3\mu_{O_2}}.$$

В (2), (3) T_m — температура плавления, E_k , E_D — энергии активации, k_* , D_* , σ_* — константы реакций, h — толщина оксидной пленки, σ — доля поверхности, покрытой аморфным оксидом, d — диаметр частиц, C_{ox} — относительное содержание окислителя в газе.

Начальными условиями задачи Коши для уравнений (1)–(3) являются условия на замороженной ударной волне (УВ) заданной амплитуды, определяемые из законов сохранения — первых интегралов уравнений (1) с нулевыми правыми частями при замороженных параметрах дискретной фазы $T_2 = T_{20}$, $u_2 = u_0$, $\rho_{2i} = \rho_{2i}^0$, u_0 — скорость УВ.

Значения начальных параметров для стехиометрической газозвеси частиц алюминия в кислороде взяты в соответствии с работами [6, 7]: $p_0 = 1$ атм, $T_{10} = T_{20} = 300$ К, $c_{21} = 880$ Дж/(кг·К), $c_{22} = 1000$ Дж/(кг·К), $\rho_{21,0} = 2700$ кг/м³, $\rho_{22,0} = 4000$ кг/м³. Входящие константы кинетических уравнений (1)–(3) приняты согласно [20, 25]: $Q = 35 \cdot 10^6$ Дж/кг, $Q_m = 0.35 \cdot 10^6$ Дж/кг, $T_m = 933$ К, $E_k = 17000$ ккал/моль, $D_* = 1.9 \cdot 10^{-9}$ м²/с, $E_D/R = 8500$ К, $k_* = 10^4$ м²/с, $\sigma_* = 2.15 \cdot 10^2$ м²/кг, $h_0 = 0.1$ мкм.

Задача Коши для системы (1)–(3) решалась с использованием пакета программ RADAU, предназначенного для решения систем жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Программы тестированы на задачах о структурах ударных и детонационных волн в газозвесах частиц алюминия и применялись для расчетов в [26].

ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ

Для верификации математической модели были рассмотрены следующие постановки задачи о воспламенении.

Определение предельных температур воспламенения частицы в статических условиях нагрева

В [27] представлены данные экспериментов по определению предельных температур воспламенения частиц алюминия, вводимых в низкоскоростной поток горячего газа. Расчеты проводились для одной из исследованных в [27] фракций (10 ÷ 20 мкм) при варьировании содержания окислителя C_{ox} . Принимались следующие расчетные параметры, соответствующие экспериментальным условиям: число Нуссельта $Nu = 2$, относительная концентрация частиц $\xi = 0.01$ (отсутствие влияния частиц на течение газа, $T_1 = \text{const}$), их размер $d = 20$ мкм. Отметим, что при нагреве в статических условиях вблизи предельных значений температур в расчетах не всегда наблюдался срыв теплового равновесия. Тогда, как и в [1, 20, 25], условием воспламенения считалось достижение дискретной фазой температуры плавления оксидной пленки (2300 К). В таблице представлены расчетные данные в сопоставлении с данными [27], видно вполне удовлетворительное соответствие. Отметим, что полное совпадение по предельным температурам воспламенения обеспечивается в модели [16], где получено удовлетворительное согласование по зависимостям времени задержки воспламенения от диаметра частиц и от температуры окружающей среды. Однако в модели [16] предельные температуры являются входящими параметрами и должны быть известны из экспериментов. Кроме того, модель [16] использовалась для условий статического нагрева частиц и не верифицировалась для динамических условий.

Предельные температуры воспламенения частиц алюминия в статических условиях

C_{ox}	\tilde{T}_1 , К	
	эксперимент [27]	расчет
0.02	2 070	2 000
0.1	1 520	1 480
0.15	1 370	1 400
0.2	1 270	1 300
0.25	1 200	1 250
0.3	1 130	1 180

Воспламенение взвесей в проходящих ударных волнах

Воспламенение взвесей частиц алюминия в кислороде за проходящими УВ экспериментально исследовалось в [19], где представлены данные по времени задержки воспламенения с момента прохождения фронта УВ во взвеси частиц размером $1 \div 25$ мкм. Нами проведены расчеты в диапазоне амплитуд УВ, обес-

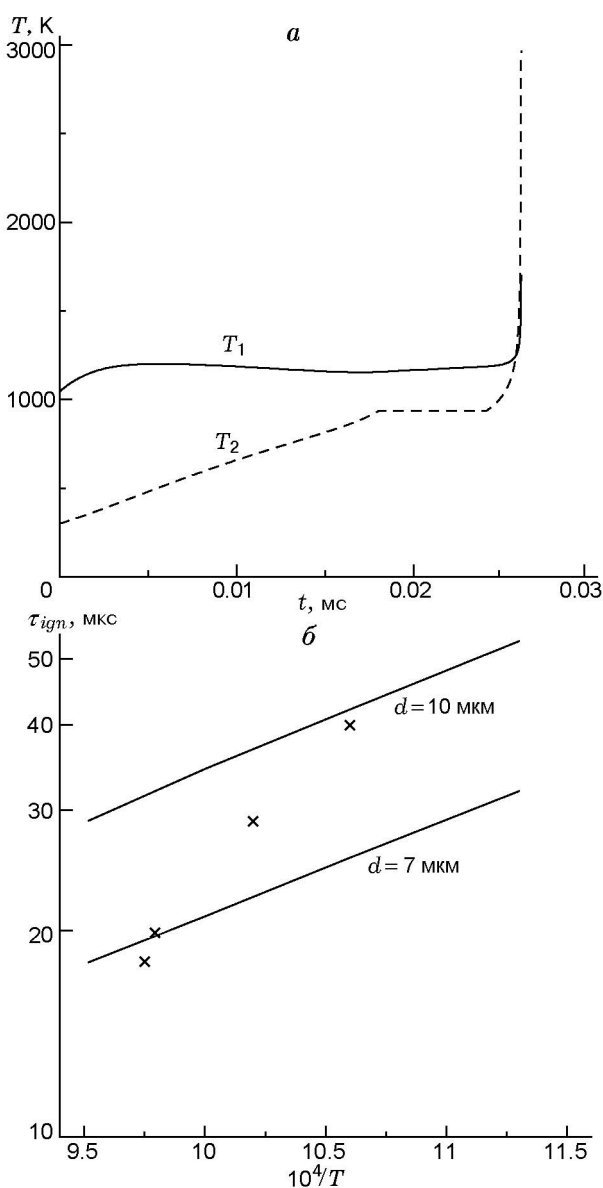


Рис. 1. Воспламенение взвесей частиц алюминия в проходящих УВ:

a — тепловая динамика фаз, $d = 8$ мкм, $u_0 = 1.2$ км/с; b — расчетные зависимости времени задержки воспламенения от температуры на УВ, значки — данные экспериментов [19]

печивающих температуры газа, соответствующие экспериментам [19] и параметрам $C_{ox} = 1$, $\xi = 0.01$. На рис. 1, a представлены характерные распределения температур газа и частиц. Отметим, что в рассматриваемом диапазоне амплитуд УВ нагрев частиц в условиях обдува ($Nu \gg 2$) всегда характеризуется срывом теплового равновесия практически сразу по окончании плавления. При этом длительность стадии плавления составляет значительную часть периода задержки воспламенения.

На рис. 1, b показаны расчетные зависимости времени задержки воспламенения от температуры газа на замороженной УВ в сравнении с экспериментальными данными [19]. Здесь не удалось получить совпадения во всем диапазоне амплитуд для какого-либо «среднего» размера частиц в рамках монодисперсного подхода, что, вероятно, связано с разбросом размеров частиц исследуемого в [19] порошка алюминия. Однако экспериментальные данные хорошо ложатся в интервал $7 \div 10$ мкм на теоретических зависимостях. (Несколько лучшее соответствие по наклону расчетных прямых получено в [15] путем введения в формулу (3) квадратичной зависимости коэффициента диффузии от давления $D_* = D_{*0}(p/p_0)^2$ без рассмотрения кинетической реакции ($k_* = 0$).)

Воспламенение взвесей в волнах гетерогенной детонации

В [28] приведены данные экспериментов по возбуждению детонации воздушных взвесей сферических частиц алюминия диаметром 5 мкм, в частности для скорости детонации 1.35 км/с указано время задержки воспламенения 14 мс. В наших расчетах $\tau_{ign} = 15.4$ мс (рис. 2, a) при $\xi = 0.2$, $C_{ox} = 0.2$ и $u_0 = 1.35$ км/с.

Воспламенение частиц алюминия в волнах гибридной детонации

Данные по задержке воспламенения частиц алюминия при гибридной детонации взвесей алюминия в кислородосодержащих горючих газовых смесях приведены в [29]. Экспериментальные задержки воспламенения частиц диаметром 10 мкм составляют $30 \div 50$ мкс в смесях с воздухом и около 10 мкс в смесях с менее инертным газом. В расчетах по модели (1)–(3) воспламенения взвеси частиц ($\xi = 0.2$) диаметром 10 мкм при параметрах, характерных

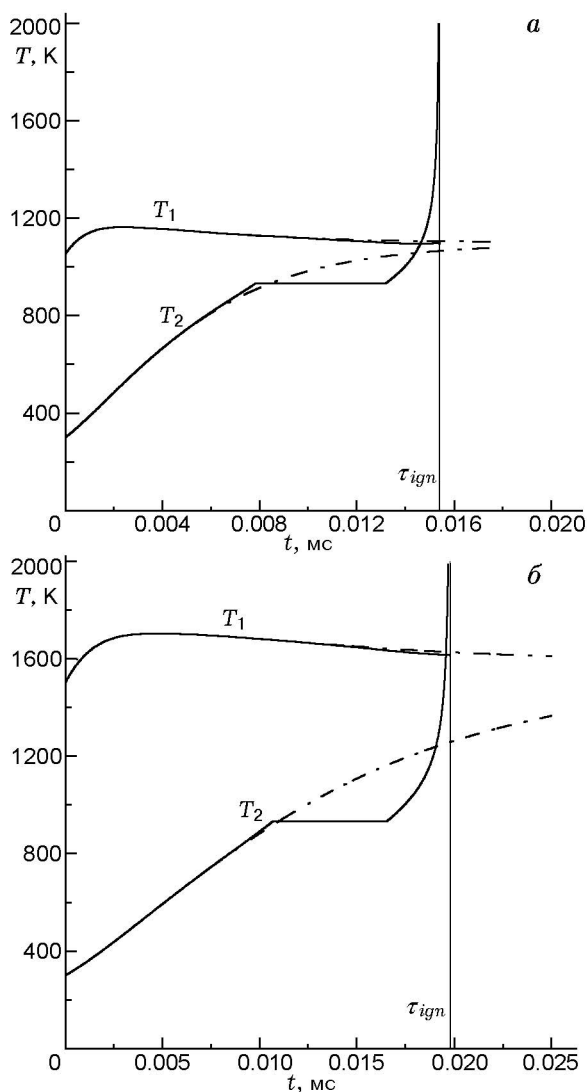


Рис. 2. Воспламенение воздушных взвесей алюминия в детонационной волне, $\xi = 0.2$:
 а — $d = 5$ мкм, $u_0 = 1.35$ км/с; б — $d = 10$ мкм, $u_0 = 1.73$ км/с

для детонации воздушных взвесей: $C_{Ox} = 0.2$, $u_0 = 1.7$ км/с, получены несколько меньшие значения τ_{ign} — около 20 мкс (рис. 2, б), а при параметрах гибридной детонации $C_{Ox} = 0.6$, $u_0 = 2$ км/с — 9.8 мкс. На рис. 2 сплошными линиями нанесены температуры фаз на стадии воспламенения, штрихпунктирной — определенные по упрощенной модели без учета плавления и окисления. Следует отметить, что, несмотря на то, что имеются существенные отличия в качественном поведении температуры частиц (наличие «полочки» на стадии плавления и резкого роста при срыве теплового

равновесия), это не вносит значительного вклада в тепловую динамику и другие характеристики газовой фазы.

Обобщая результаты тестовых расчетов, можно заключить, что модель (1)–(3) с приведенными кинетическими константами вполне адекватно описывает воспламенение взвеси частиц алюминия не только в статических условиях, но и в динамических условиях, реализуемых за проходящими УВ, а также волнами гетерогенной и гибридной детонации. Удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных в совокупности позволяет считать константы модели достаточно универсальными для различных условий и сред.

СТАДИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДЕТОНАЦИИ ВЗВЕСЕЙ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ В КИСЛОРОДЕ

Особенностью детонационного течения является зависимость скорости нормальной детонации от концентрации частиц. Обычно рассматриваются стехиометрические составы, для которых инициирование детонации происходит с минимальными энергетическими затратами.

На рис. 3 показана стадия воспламенения монодисперсной стехиометрической взвеси частиц алюминия диаметром $d = 10$ мкм в кислороде ($\xi = 0.55$, $C_{Ox} = 1$) для волн нормальной (самоподдерживающейся) детонации Чепмена — Жуке $u_0 = 1.6$ км/с и пересжатой детонации $u_0 = 2.2$ км/с ($D/D_{CJ} = 1.4$). Как и на рис. 2, штрихпунктирные линии соответствуют нагреву частицы без учета плавления и окисления. Из сравнения этих кривых видно, что на стадии задержки воспламенения предпламенное окисление и плавление дают противоположный компенсирующий вклад в нагрев частиц. Вследствие этого игнорирование обоих процессов (плавления и окисления) в ряде моделей оправданно и не приводит к большим ошибкам в описании структуры и распространения плоских волн детонации. Однако применение таких моделей для более широкого класса задач, относящихся к переходным процессам (ячеистой детонации, распространению в изменяющихся объемах, дифракции на угловых конфигурациях и т. д.), в частности для определения критических условий распространения и срыва, требует уточнения температурного критерия воспламенения.

Введем понятие адекватного температурного критерия воспламенения для упрощенных

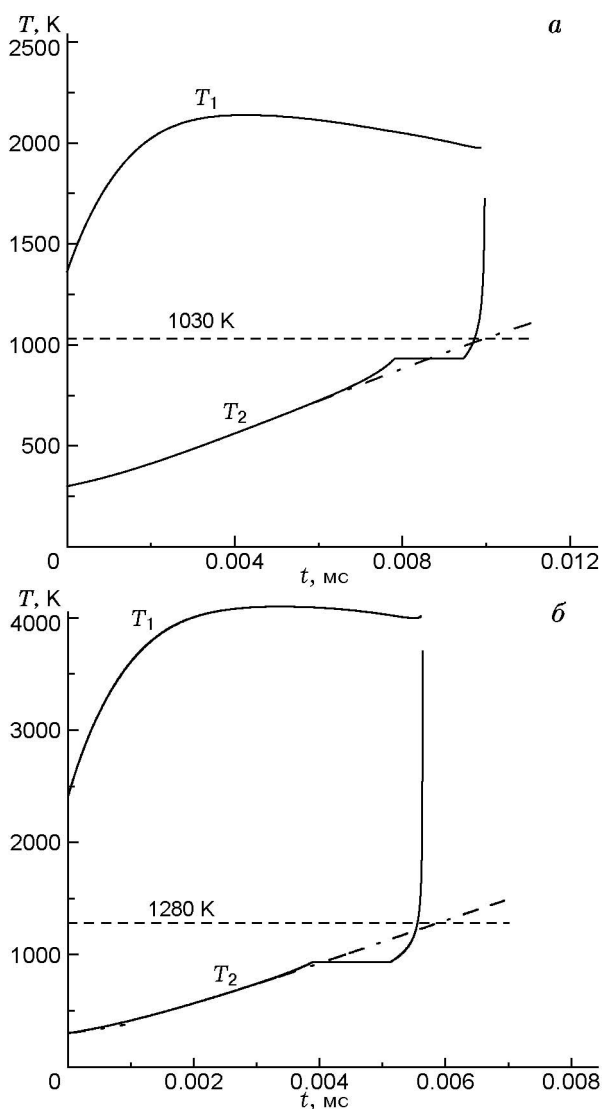


Рис. 3. Воспламенение кислородной взвеси частиц алюминия, $\xi = 0.55$, $d = 10$ мкм:
a — нормальная детонация ($D/D_{CJ} = 1$), *б* — пересжатая детонация ($D/D_{CJ} = 1.4$)

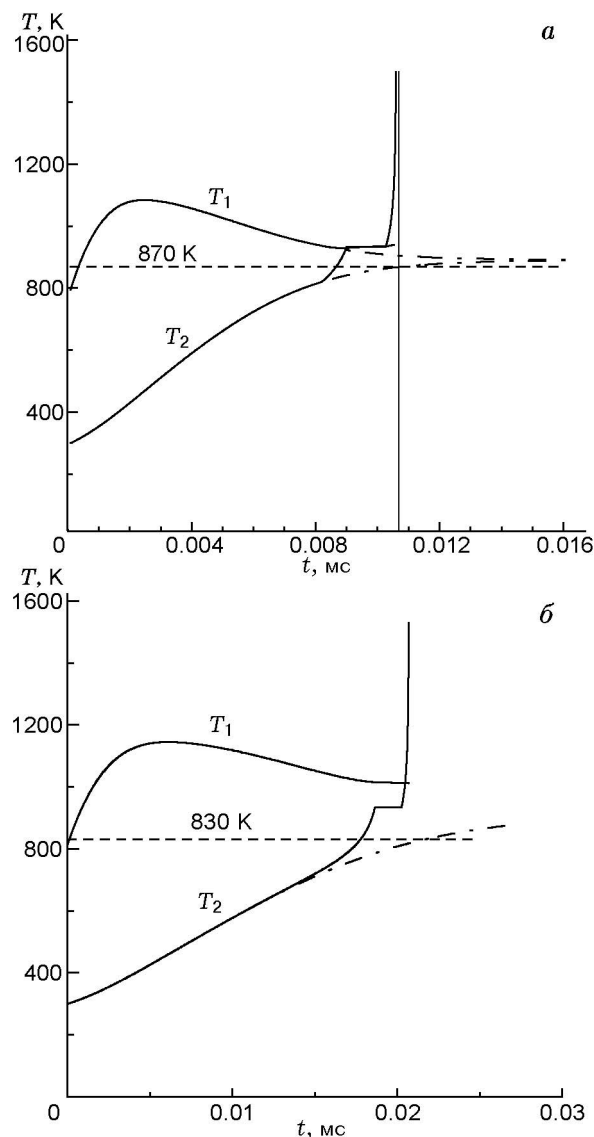


Рис. 4. Воспламенение взвеси в затухающей детонационной волне, $u_0 = 1.1$ км/с ($D/D_{CJ} = 0.7$):
a — $d = 5$ мкм, *б* — $d = 10$ мкм

(без учета плавления и предпламенного окисления) моделей. Определим температуру, время достижения которой совпадает с временем задержки воспламенения при решении полной задачи о срыве теплового равновесия (1)–(3). На рис. 3, 4 это соответствует пересечению в одной точке штриховой и штрихпунктирной линий с вертикальной асимптотой кривой T_2 (как показано на рис. 4, *a*). Определенные таким образом значения адекватной температуры воспламенения различны в зависимости от амплитуды УВ, радиуса частицы и содержания окис-

лителя.

Для стехиометрических взвесей в кислороде в волнах Чепмена — Жуге и пересжатой детонации (см. рис. 3) адекватная температура воспламенения превышает значение 900 К, принятое в расчетах [3–10]. В нестационарных процессах скорость замороженной УВ может быть меньше скорости Чепмена — Жуге (при временном ослаблении детонационных волн или срыве детонации). Результаты расчетов для близкой к нижнему пределу скорости УВ представлены на рис. 4 для частиц двух раз-

меров. Значение $u_0 = 1.1$ км/с также отвечает предельному затуханию на участках фронта в режиме ячеистой детонации ($D/D_{CJ} = 0.7$). При меньшей скорости ($u_0 = 1$ км/с) срыва теплового равновесия (воспламенения) уже не происходит, имеет место регулярный нагрев до равновесного значения температуры смеси, не превышающего 900 К. Из сравнения данных рис. 4, *a* и 4, *б* видно, что температура воспламенения зависит от диаметра, но в обоих случаях несколько ниже 900 К. Таким образом, критерий 900 К, принятый в численном моделировании дифракции на обратном уступе [10, 30], соответствует критическим условиям распространения детонации.

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ТЕМПЕРАТУРНЫЙ КРИТЕРИЙ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ВЗВЕСЕЙ АЛЮМИНИЯ

Определим зависимости адекватной температуры воспламенения T_{ign} от параметров взвеси и характеристик ударных (детонационных) волн. На рис. 5 представлены значения T_{ign} в зависимости от амплитуды УВ в воздушных и кислородных взвесях. Рассмотрены взвеси с двумя концентрациями частиц разного диаметра в диапазоне 1 ÷ 10 мкм. Как видно, адекватные температуры воспламенения T_{ign} меняются в широких пределах: от 900 К (амплитуды ниже 1.2 км/с здесь не представлены) до 1800 К. Наблюдается повышение T_{ign} при уменьшении содержания окислителя C_{ox} и размера частиц d . При фиксированной амплитуде УВ температура воспламенения повышается с ростом концентрации (ср. сплошные и штриховые линии на рис. 5), что обусловлено зависимостью степени увеличения температуры газа в зоне релаксации от концентрации частиц (см. рис. 2–4). Отметим, что здесь нет противоречия с известными данными о зависимости предельной температуры воспламенения взвесей металлических частиц от массовой загрузки [31], поскольку речь идет о температуре частицы в момент воспламенения, а не о температуре газа, обеспечивающей воспламенение.

Для удобства применения температурного критерия воспламенения в численных расчетах желательно определить зависимости T_{ign} от локальных характеристик в точке воспламенения. Оказалось возможным получить также универсальные по концентрациям критерии воспламенения. Таковыми являются зависимости T_{ign} от локальной температуры газа T_1 , что позволяет выразить критическое условие воспламенения как связь между температурами фаз. Эти зависимости представлены на рис. 6, где, как видно, сплошные ($\xi_0 = 0.55$) и штриховые линии ($\xi_0 = 0.2$) практически совпадают.

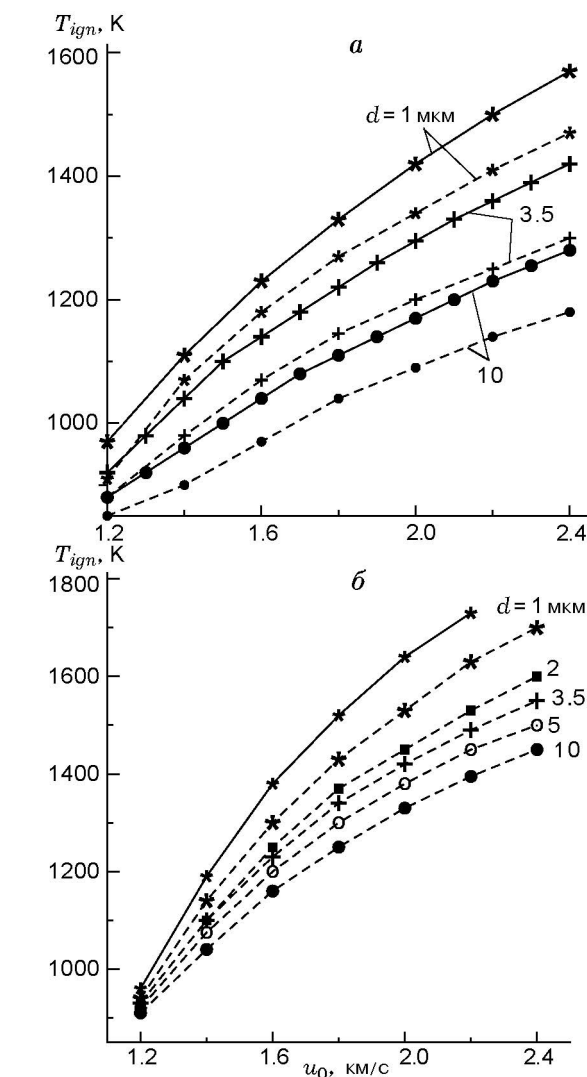


Рис. 5. Зависимости температуры воспламенения от скорости УВ в кислородных (а) и воздушных (б) взвесях:

сплошные линии — $\xi_0 = 0.55$,
штриховые — $\xi_0 = 0.2$

ри воспламенения. Таковыми являются зависимости T_{ign} от локальной температуры газа T_1 , что позволяет выразить критическое условие воспламенения как связь между температурами фаз. Эти зависимости представлены на рис. 6, где, как видно, сплошные ($\xi_0 = 0.55$) и штриховые линии ($\xi_0 = 0.2$) практически совпадают.

Для всей совокупности кривых на рис. 6 аппроксимирующие зависимости можно представить как аналитические функции вида

$$T_{ign} = (A + B/\sqrt{d/d_0}) +$$

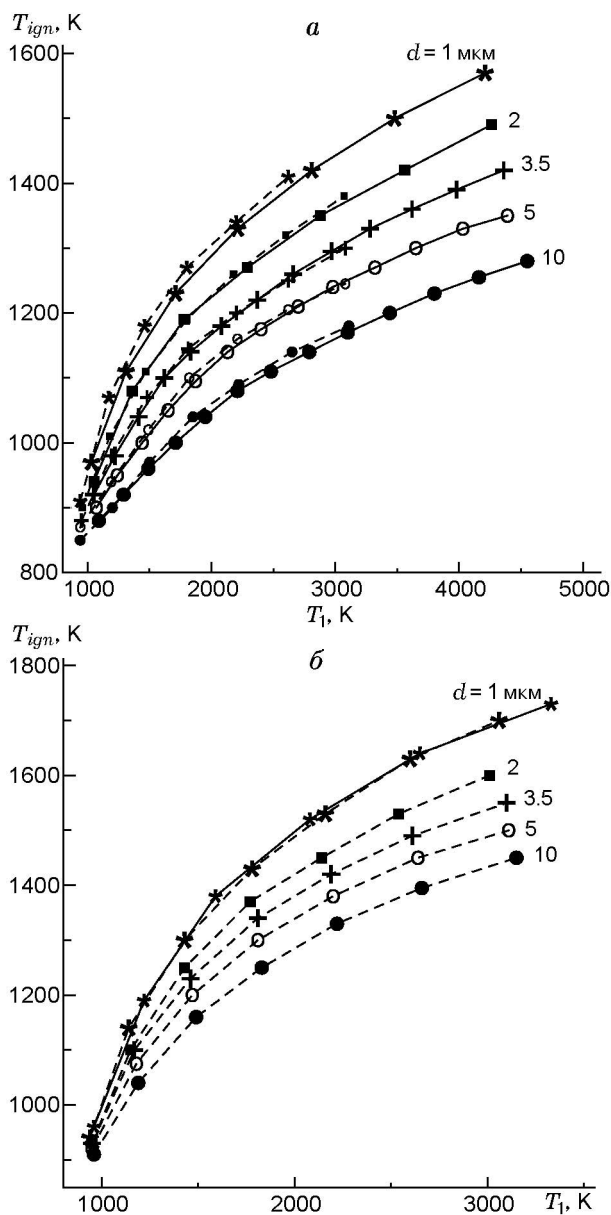


Рис. 6. Зависимости T_{ign} от локальной температуры газа в точке воспламенения для кислородных (а) и воздушных (б) взвесей:

сплошные линии — $\xi_0 = 0.55$,
штриховые — $\xi_0 = 0.2$

$$+ \left(C + 800 / \sqrt{\sqrt{d/d_0}} \right) \exp \left(- \frac{1800 C_{ox}}{T_1} \right). \quad (4)$$

Нами определены следующие значения входящих констант: для кислородных смесей ($C_{ox} = 1$) $A = 670$, $B = 160$, $C = 380$; для воздушных ($C_{ox} = 0.2$) — $A = 260$, $B = -100$, $C = 1100$; $d_0 = 1$ мкм. Минимальные значения на рис. 6 составляют ≈ 830 К в кислороде (см.

также рис. 4, б) и ≈ 900 К в воздухе, что можно считать адекватными температурами воспламенения при $T_1 < 1000$ К.

Отметим факт увеличения температуры воспламенения при уменьшении содержания окислителя, а также при увеличении амплитуды УВ, т. е. в пересжатых детонационных волнах и волнах гибридной детонации. Это качественно подтверждает различие критических температур воспламенения при гетерогенной и гибридной детонации, принимаемых в моделях [11–13] в соответствии с данными экспериментов.

ФАКТОР ВОСПЛАМЕНЕНИЯ В СЛУЧАЕ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ

Монодисперсные взвеси

Уравнения двумерных нестационарных течений в рамках физико-математической модели детонации газозвесей частиц алюминия представлены в [8]. Численное моделирование ячеистой детонации в монодисперсных, бидисперсных и многофракционных газозвесях частиц алюминия в кислороде проводилось в [8, 9, 32] на основе критерия $T_{ign} = 900$ К. При этом, как установлено в [8], варьирование температуры воспламенения от 900 до 1200 К не отражается существенно на результатах численного моделирования ячеистой детонации. Применимость динамического критерия (4), полученного на основе анализа плоских стационарных волн, для нестационарных многомерных течений ячеистой детонации обусловлена малостью зон задержки воспламенения в сравнении с размером ячейки и радиусом кривизны искривленного фронта. Кроме того, период задержки воспламенения (для частиц размером 5 мкм даже в затухающей фазе $\tau_{ign} \approx 0.01$ мс, рис. 4, а) много меньше периода прохождения цикла ($2\lambda/D \approx 0.1$ мс для частиц диаметром 5 мкм [8], где λ — характерный размер ячейки).

На рис. 7 для сравнения приведены результаты расчетов одной и той же задачи по формированию ячеистой детонации с тремя различными критериями воспламенения. Как и в [8], представлены картины максимального за историю давления $p_{\max}(x, y) = \max_t [p(x, y, t)]$. Видно, что число формирующихся в канале ячеек во всех трех случаях одинаково. Различия касаются амплитудных характеристик ячеистой

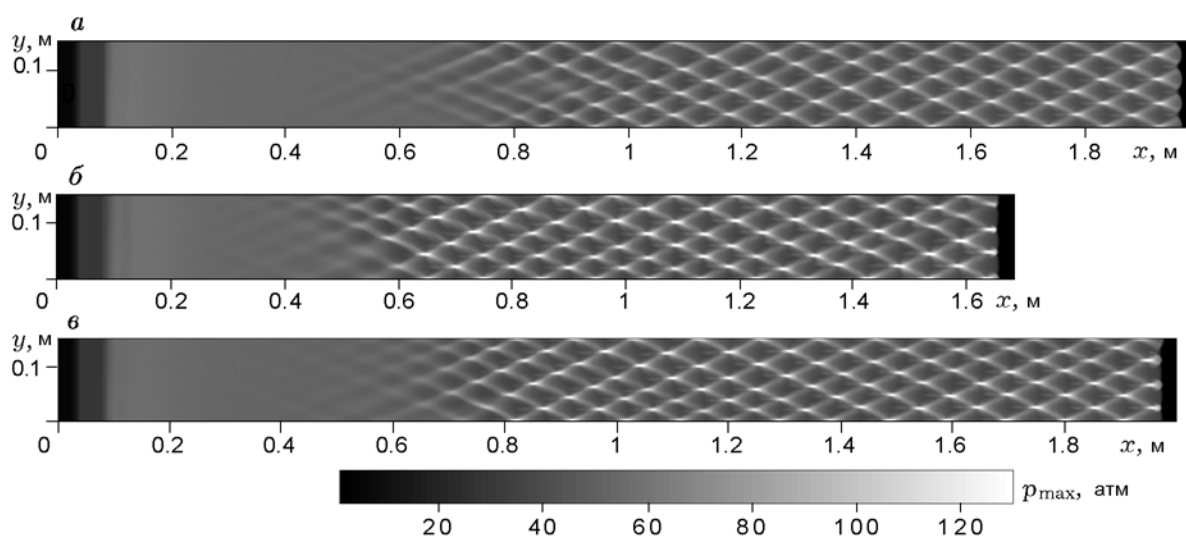


Рис. 7. Формирование ячеистой детонации в монодисперсной взвеси частиц диаметром $d = 3$ мкм при различных критериях воспламенения:
 а — 900 К, б — 1200 К, в — формула (4)

детонации — значений максимального давления в тройных точках при их столкновении. Здесь при динамическом критерии (4) и температурном критерии 900 К получены одинаковые результаты — 150 атм, а при критерии 1200 К — более высокие значения давления (170 атм). Степень неравномерности ячеек на рис. 7, б и 7, в практически одинакова, но несколько больше, чем на рис. 7, а. В целом влияние температурного критерия при моделировании ячеистой детонации в монодисперсных взвесях можно считать несущественным, а результаты, полученные в [8] при $T_{ign} = 900$ К, — адекватными.

Полидисперсные взвеси

Ячеистая детонация полидисперсных взвесей характеризуется свойством вырождения [32]. Это свойство связано с утратой характерного масштаба расстояния между поперечными волнами на пересжатых или затухающих участках фронта ячеистой детонации [9]. Вырождение ячеистой детонации проявляется в ослаблении поперечных волн, снижении амплитуды пульсаций в течении и спрямлении фронта. Ослабление пульсаций за фронтом ячеистой детонации наблюдалось экспериментально в [14] для воздушных взвесей порошков алюминия, особенно для порошка, фотография которого показывает очевидный разброс в разме-

рах частиц.

Влияние критерия воспламенения на результат численных расчетов в трехфракционной смеси при $\eta = \rho_{30}/\rho_0 = 0.6$ иллюстрирует рис. 8 (теневая шкала соответствует рис. 7). Здесь следует отметить, что формула (4) дает картину более развитой (т. е. менее вырожденной) ячеистой детонации. Светлые линии на рис. 8, б ярче, максимальное давление в тройных точках выше (до 120 атм), чем на рис. 8, а (85 атм). В канале той же ширины формируются только 3.5 ячейки вместо четырех, т. е.

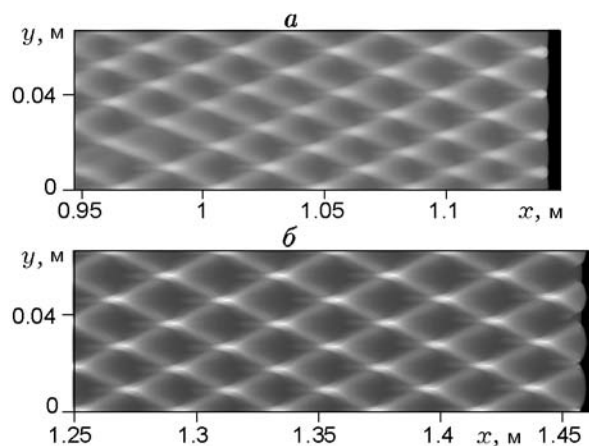


Рис. 8. Ячеистая детонация трехфракционной смеси (1, 2 и 3.5 мкм) $\eta = 0.6$

ячейка является несколько более крупной. Тем не менее вырождение ячеистой детонации и при критерии (4) имеет место, а при значительной дисперсии в распределении частиц по размерам является полной. Причем устойчивое распространение плоской детонации наблюдается при тех же составах, что и в [32].

На рис. 9 показаны профили параметров вырожденной ячеистой детонации при доле средней фракции $\eta = 0.4$. Здесь, несмотря на начальные возмущения, в двумерных расчетах задачи инициирования формируется и устойчи-

ливо распространяется плоская детонационная волна [32]. В данном случае при различных критериях воспламенения скорость детонации определяется идентично (рис. 9, а), волновые структуры практически совпадают. Некоторые отличия отмечаются в местоположении фронта УВ, что обусловлено влиянием воспламенения на процесс инициирования, а также в профилях плотности дискретных фракций, в частности амплитуды ρ -слоя (рис. 9, б). Согласно данным, представленным на рис. 5, 6, наибольшие различия касаются мелких фракций. В целом можно заключить, что применение адекватного динамического критерия воспламенения для анализа ячеистой детонации позволяет несколько уточнить структуры течения и размеры ячеек. При этом основные выводы работ [9, 32], полученные из обобщения результатов расчетов с $T_{ign} = 900$ К, в частности о влиянии процессов релаксации на размер ячейки, а также о частичном и полном вырождении ячеек в полидисперсных взвесах, остаются в силе.

ВЫВОДЫ

В работе предложен и обоснован универсальный температурный критерий воспламенения взвесей частиц алюминия в ударных и детонационных волнах, адекватно воспроизводящий условия воспламенения в моделях механики гетерогенных сред без учета процессов низкотемпературного окисления и плавления частиц. Для этого:

- представлена физико-математическая модель воспламенения взвесей частиц алюминия в статических и динамических условиях с учетом плавления, реакций окисления алюминия и полиморфных фазовых превращений оксидного слоя;
- проведена верификация модели в средах с различным содержанием окислителя и на ее основе определены значения адекватной температуры воспламенения для моделей, игнорирующих плавление и предпламенное окисление;
- для воздушных и кислородных взвесей представлены универсальные по концентрациям зависимости адекватной температуры воспламенения от текущих локальных параметров газа, размера частиц;
- показано, что используемые ранее критерии воспламенения корректны при численном моделировании ячеистой детонации монодисперсных взвесей или детонации существен-

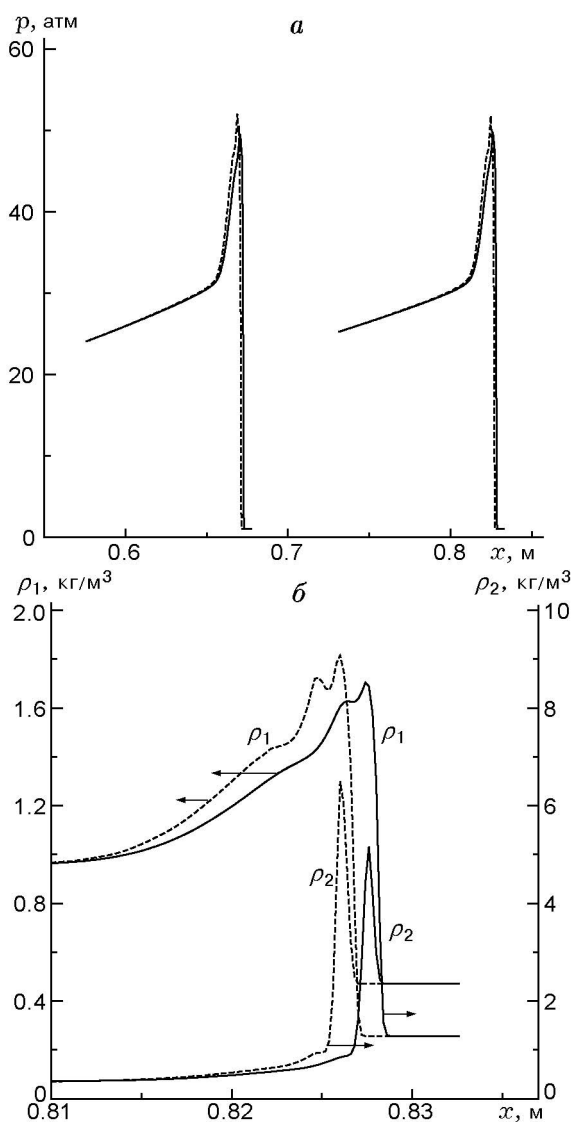


Рис. 9. Профили параметров вырожденной ячеистой детонации трехфракционной смеси (1, 2 и 3.5 мкм), $\eta = 0.4$, $\Delta t = 0.1$ мс:

а — сплошные линии — $T_{ign} = 900$ К, штриховые линии — формула (4)

но полидисперсных смесей, характеризуемой полным вырождением ячеек.

Авторы благодарят акад. В. А. Левина за полезные обсуждения, инициировавшие данное исследование.

ЛИТЕРАТУРА

1. Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М. Математическое моделирование воспламенения частиц металла в высокотемпературном потоке за ударной волной // Физика горения и взрыва. — 1982. — Т. 18, № 3. — С. 5–9.
2. 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.
3. Еремеева Т. А., Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М. К теории идеальной и неидеальной детонации аэрозвесей. — Новосибирск, 1986. — (Препр. /АН СССР, Сиб. отд-ние. ИТПМ; № 37-86).
4. Федоров А. В. Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // Физика горения и взрыва. — 1992. — Т. 28, № 3. — С. 72–83.
5. Федоров А. В., Хмель Т. А. Определение самоподдерживающихся режимов неидеальной детонации на модели аэрозвеси частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 1998. — Т. 34, № 5. — С. 95–102.
6. 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.
7. Хмель Т. А., Федоров А. В. Взаимодействие ударной волны с облаком частиц алюминия в канале // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 2. — С. 89–98.
8. Федоров А. В., Хмель Т. А. Численное моделирование формирования ячейистой гетерогенной детонации частиц алюминия в кислороде // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 4. — С. 84–98.
9. Федоров А. В., Хмель Т. А. Формирование и вырождение ячейистой детонации в бидисперсных газовзвесах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 109–120.
10. Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Дифракция плоской детонационной волны на обратном уступе в газовзвеси // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 5. — С. 95–107.
11. Khasainov B. A., Veysiére B. Steady, plane, double-front detonations in gaseous detonable mixtures containing a suspension of aluminum particles // Dynamic of Explosions / A. L. Kuhl et al. (Eds). — 1988. — P. 284–299. — (Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 114).
12. 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.
13. Benkewicz 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.
14. Zhang F., Gerrard K. B., Ruypley R. Reaction mechanism of aluminum particles — air detonation // Seventh Intern. Symp. on Hazard, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, St. Petersburg, Russia, July 7–11, 2008: Proc. — V. II. — P. 223–237.
15. Kazakov Yu. V., Medvedev A. E., Fedorov A. V., Fomin V. M. Mathematical modeling of ignition in dusty gases // Archivum Combust. — 1987. — V. 7, N 1–2. — P. 7–18.
16. Федоров А. В., Харламова Ю. В. Воспламенение частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 5. — С. 65–68.
17. Григорьев Ю. М., Гальченко Ю. А., Мержанов А. Г. Исследование кинетики высокотемпературного взаимодействия алюминия с кислородом методом воспламенения // Физика горения и взрыва. — 1973. — Т. 9, № 2. — С. 191–199.
18. 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.
19. Бойко В. М., Папырин А. Н., Поплавский С. В. Воспламенение газовзвесей дисперсных материалов за ударными волнами // Тр. 1-го Междунар. коллоквиума по взрываемости промышленных пылей. — Варшава, 1985. — Ч. 2. — С. 188–195.
20. Гуревич М. А., Озеров Е. С., Юринов А. А. О влиянии пленки окисла на характеристики воспламенения алюминия // Физика горения и взрыва. — 1978. — Т. 14, № 4. — С. 50–54.
21. Trunov M. A., Schoenitz M., Zhu X., Dreizin E. L. Effect of polymorphic phase transformations in Al_2O_3 film on oxidation kinetics of aluminum powders // Combust. and Flame. — 2005. — V. 140. — P. 310–318.
22. Похил П. Ф., Логачев В. С., Мальцев В. М. О механизме горения частиц металла // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 3. — С. 407–410.
23. Федоров А. В. Математическое моделирование движения аэрозвеси с учетом неравновесности плавления (кристаллизации) // Физика горения и взрыва. — 1994. — Т. 30, № 4. — С. 91–99.

24. **Федоров А. В., Фомин В. М.** Структура ударной волны в смеси газа и плавящихся частиц // ПМТФ. — 1986. — № 2. — С. 133–138.
25. **Гуревич М. А., Озерова Г. Е., Степанов А. М.** Гетерогенное воспламенение алюминиевой частицы в кислороде и водяном паре // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 3. — С. 327–335.
26. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Структура и инициирование плоских волн детонации в бидисперсной газозвеси частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 2. — С. 46–55.
27. **Гуревич М. А., Лапкина К. И., Озеров Е. С.** Предельные условия воспламенения частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 2. — С. 172–176.
28. **Tulis A. J., Selman J. R.** Detonation tube studies of aluminum particles dispersed in air // Proc. of the 19th Intern. Symp. on Combustion. — Pittsburgh, PA: Combustion Inst., 1982. — P. 655–663.
29. **Veysiere B.** Structure of the detonations in gaseous mixtures containing aluminum particles in suspensions // Progress in Astronautics and Aeronautics. — 1986. — V. 114. — P. 170–185.
30. **Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А.** Распространение детонационных волн в газозвесах в каналах с внезапным расширением // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 1. — С. 80–91.
31. **Федоров А. В., Фомин В. М., Гостеев Ю. А.** Динамика и воспламенение газозвесей. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006.
32. **Fedorov A. V., Khmel T. A., Kratova Yu. V.** Cellular detonation formation and propagation in polydisperse mixtures // Seventh Intern. Symp. on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, S. Petersburg, Russia, July 7–11, 2008: Proc. — V. II. — P. 238–249.

*Поступила в редакцию 8/X 2010 г.,
в окончательном варианте — 19/XI 2010 г.*
