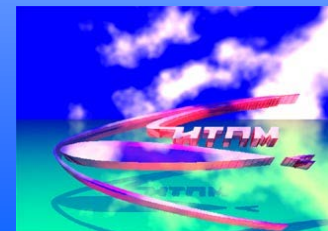


XIV Международная конференция «Забабахинские научные чтения»
Снежинск, 17-22 марта 2019 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕТОНАЦИИ В СУБМИКРОННЫХ И НАНОДИСПЕРСНЫХ ВЗВЕСЯХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Т.А. Хмель, С.А. Лаврук, С.И. Толкачева

**Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Россия**





Актуальность проблемы

Порошки алюминия широко используются в промышленных технологиях, что требует анализа их взрывоопасности. Кроме того, порошки алюминия имеют большие перспективы применения в составе смесевых топлив и в промышленных технологиях.

Как в отношении взрывобезопасности, так и для развития детонационных технологий актуальным является определение режимов и критических условий распространения детонации в областях сложной геометрии.

Характеристики гетерогенной детонации зависят от кинетики горения частиц, которая меняется от микроразмерных частиц к наноразмерным соответственно переходу от диффузионного режима горения к кинетическому.

Свойства гетерогенной детонации газовзвесей зависят также от соотношения масштабов релаксационных процессов. С переходом от микроразмерных частиц к наноразмерным зоны скоростной и тепловой релаксации сокращаются как $d^{1.5-2}$, а зоны горения – как $d^{0.3}$.



Цели исследования:

На основе развитой физико-математической модели детонации газовзвесей частиц алюминия в кислороде субмикронной и наноразмерной дисперсности в рамках двумерных расчетов

- **проанализировать режимы и критические условия распространения волн ячейистой детонации в монодисперсных и бидисперсных взвесах в каналах с линейным расширением;**
- **выявить общие свойства и различия структур ячейистой детонации микроразмерных и наноразмерных монодисперсных и бидисперсных взвесей;**
- **провести качественное сопоставление с известными экспериментальными данными.**



Модель механики сплошной среды

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{\Gamma}$$

Уравнения Эйлера для смеси газа и частиц
(двухтемпературное двухскоростное приближение)

Взаимодействия

$$\mathbf{\Gamma}_2 = -\mathbf{\Gamma}_1 = \begin{pmatrix} -J \\ f_x \\ f_y \\ q + f_x u_2 + f_y v_2 \end{pmatrix}$$

Газ

$$\mathbf{W}_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_1 E_1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ p_1 + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p_1 u_1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p_1 + \rho_1 v_1^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p_1 v_1 \end{pmatrix}$$

Уравнения состояния

$$p_1 = \rho_1 R T_1 \quad \rho_i = \rho_{ii} m_i$$

$$E_1 = c_{v1} T_1 + 0.5(u_1^2 + v_1^2)$$

$$\rho_{22} = \text{const} \quad m_1 = 1 - m_2$$

$$E_2 = c_{v2} T_2 + 0.5(u_2^2 + v_2^2) + Q$$

Частицы

$$\mathbf{W}_2 = \begin{pmatrix} \rho_2 \\ \rho_2 u_2 \\ \rho_2 v_2 \\ \rho_2 E_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} \rho_2 u_2 \\ \rho_2 u_2^2 \\ \rho_2 u_2 v_2 \\ \rho_2 u_2 E_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{G}_2 = \begin{pmatrix} \rho_2 v_2 \\ \rho_2 u_2 v_2 \\ \rho_2 v_2^2 \\ \rho_2 v_2 E_2 \end{pmatrix}$$



Взаимодействие между газом и частицами

Транспортные свойства

$$\vec{f} = \frac{\rho_2}{\tau_u} (\vec{u}_1 - \vec{u}_2)$$

Характерное время скоростной релаксации

$$\tau_u = 4d \rho_{22} C_c / 3c_D \rho_{11} |u_1 - u_2|$$

Поправка Кеннингема

$$C_c = 1 + 2Kn[1.257 + 0.4 \exp(-1.1 / 2Kn)]$$

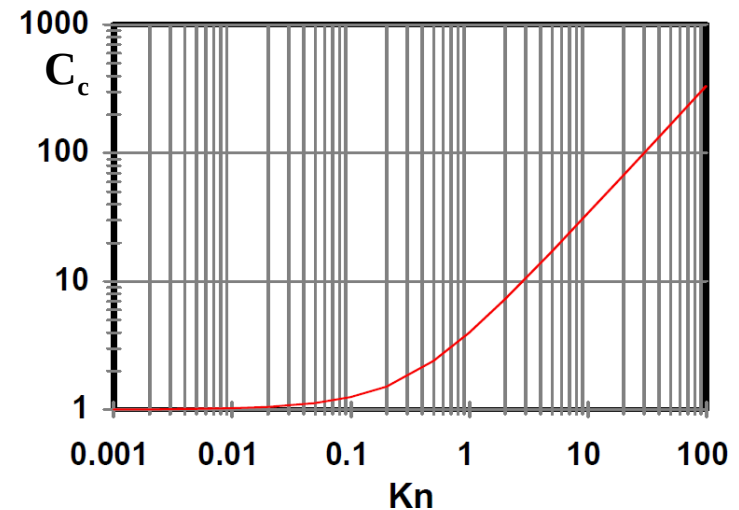
Число Кнудсена

$$Kn = RT_1 / (\sqrt{2} \pi d_g^2 N_A p d)$$

D_g – размер молекулы газа, N_A – число Авогадро

$$c_D(Re, M_2) = (1 + \exp(-\frac{0.43}{M_2^{4.67}}))(0.38 + \frac{24}{Re} + \frac{4}{\sqrt{Re}})$$

$$M_2 = \frac{|u_1 - u_2| \sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}} \quad Re = \frac{\rho_{11} d |u_1 - u_2|}{\mu}$$



Сопротивление частиц в сверхзвуковом потоке газа (Бойко и др., 1996)



Взаимодействие между газом и частицами

Теплообмен

$$q = \frac{\rho_2}{c_{v2} \tau_T} (T_1 - T_2)$$

Характерное время тепловой релаксации

Континуальный режим теплообмена ($Kn < 0.01$)

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

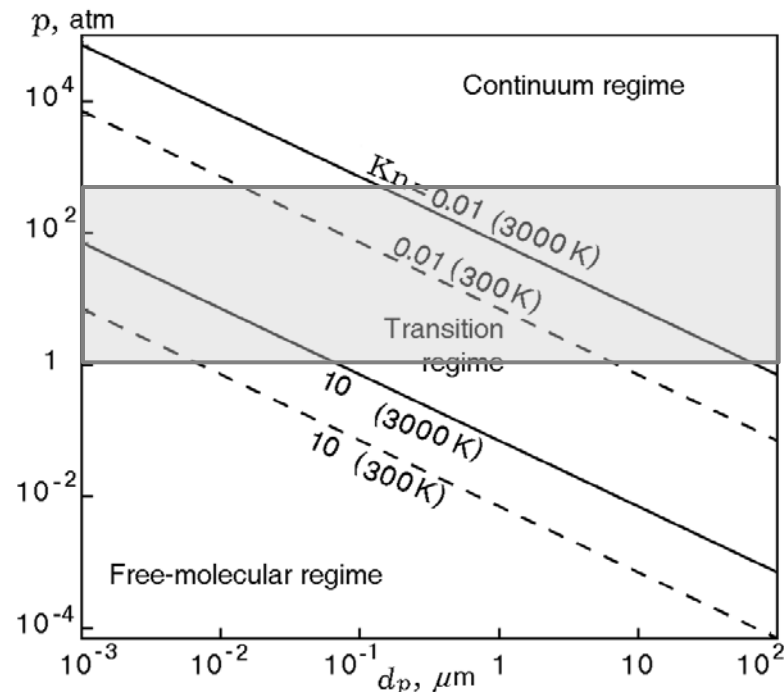
Свободно-молекулярный режим теплообмена ($Kn < 10$)

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

Аккомодационный коэффициент $\alpha = 0.43$
(S.-A. Kuhlmann et al, 2006)

Переходной режим ($0.01 \leq Kn \leq 10$)

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



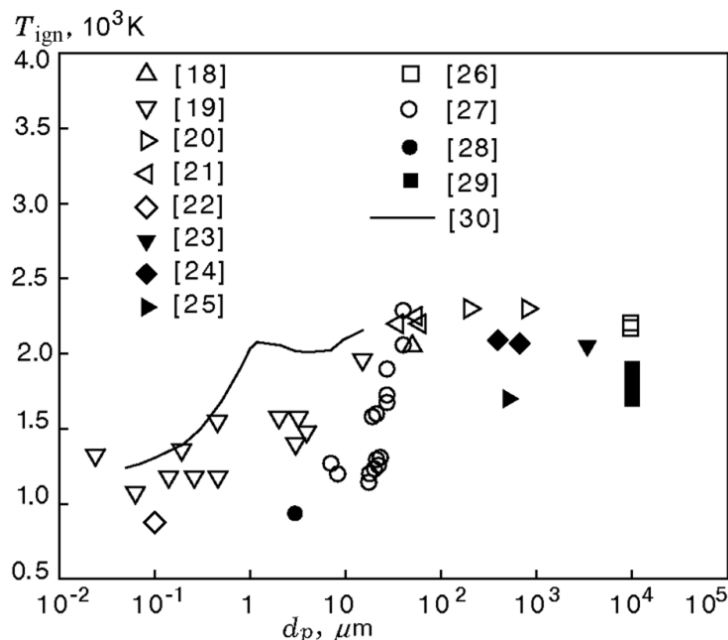
Серая область – детонационные волны



Воспламенение частиц алюминия

Температура воспламенения

Минимальная температура окружающего газа для воспламенения частиц алюминия



Экспериментальные данные, приведенные в обзоре D.S. Sundaram, V. Yang, and V.E. Zarko, 2015.

Температура воспламенения в модели – температура частиц, при которой происходит переход от низкотемпературной реакции окисления к реакции гетерогенного горения

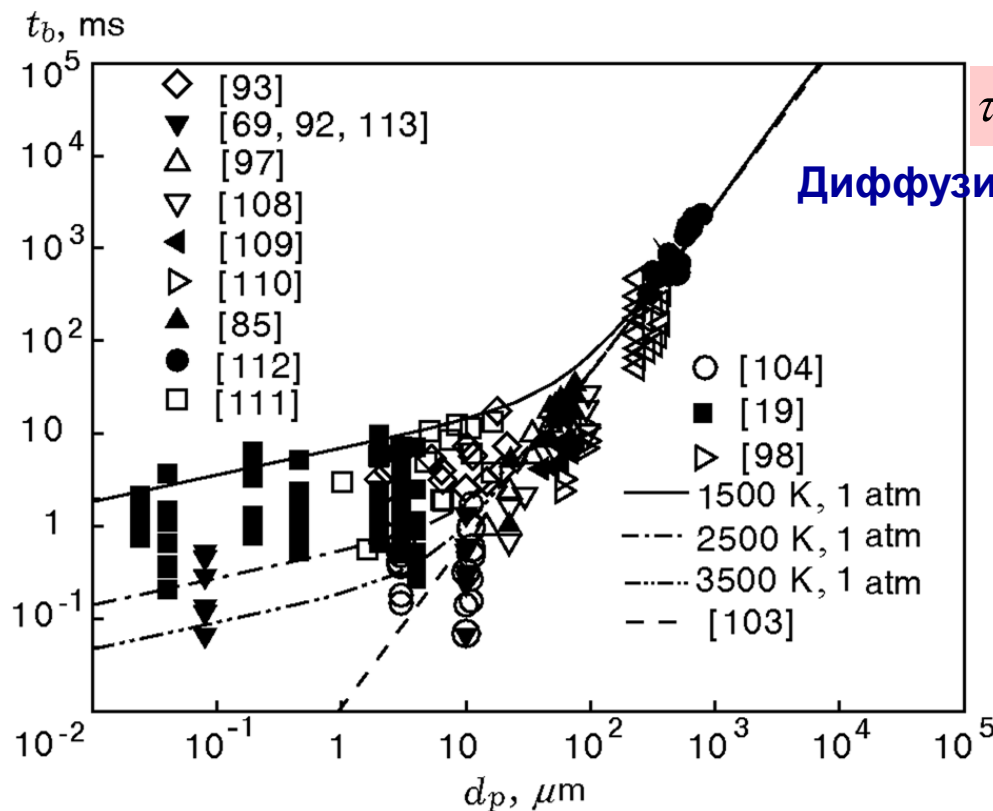
1. Температура воспламенения микроразмерных частиц в динамических условиях в УВ значительно ниже, чем в статических условиях
2. Воспламенение наночастиц алюминия происходит при температуре плавления ядра согласно расплавно-дисперсионному механизму (V. I. Levitas et al, J. of Physical Chemistry C, 2009)

$$T_{ign} = T_{melt} = 930\text{K}$$



Режимы горения частиц алюминия

Экспериментальные данные, приведенные в обзоре
D.S. Sundaram, V. Yang, and V.E. Zarko, 2015;



$$\tau_b \sim d^{1.8 \div 2}$$

$$E_a = 0$$

Диффузионный режим горения

Переход к кинетическому
режиму горения

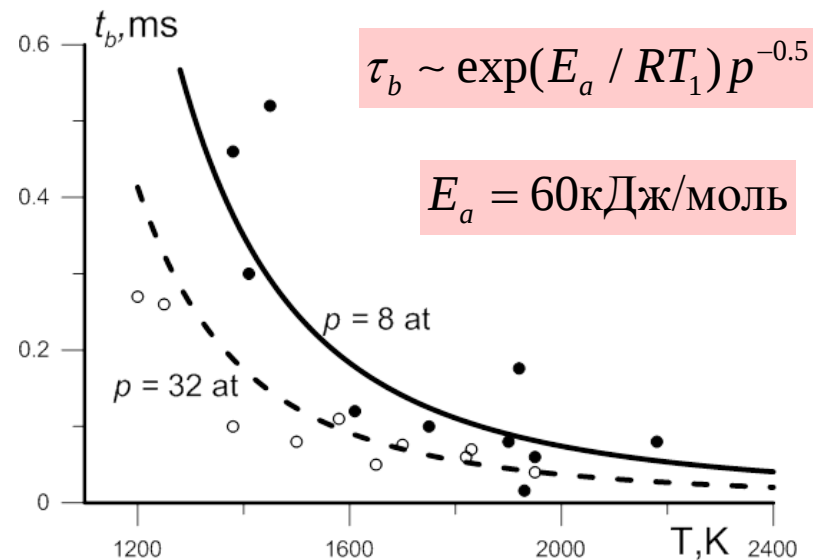
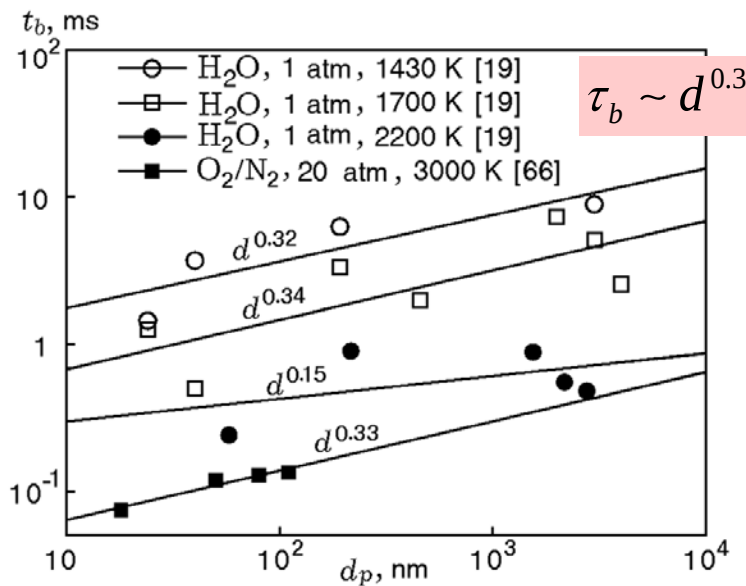
Горение крупных частиц протекает в диффузионном режиме (время горения не зависит от температуры и слабо зависит от давления). Горение частиц размером менее 10 мкм происходит в переходном режиме от диффузионного к кинетическому.



Горение наночастиц алюминия

Экспериментальные данные,
приведенные в обзоре D.S. Sundaram,
V. Yang, and V.E. Zarko, 2015;

Эксперименты: Т. Bazyn,
Н. Krier, N. Glumac, 2006

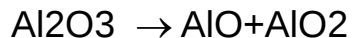
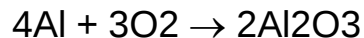


Время горения частиц 80 nm:
значки – эксперименты, кривые – наши расчеты

Горение наночастиц характеризуется аррениусовской зависимостью времени горения от температуры (энергия активации 60 кДж/моль), степенной зависимостью от давления с показателем -0.5 и степенной зависимостью от диаметра частицы с показателем 0.3.



Учет неполного сгорания алюминия в детонационной волне

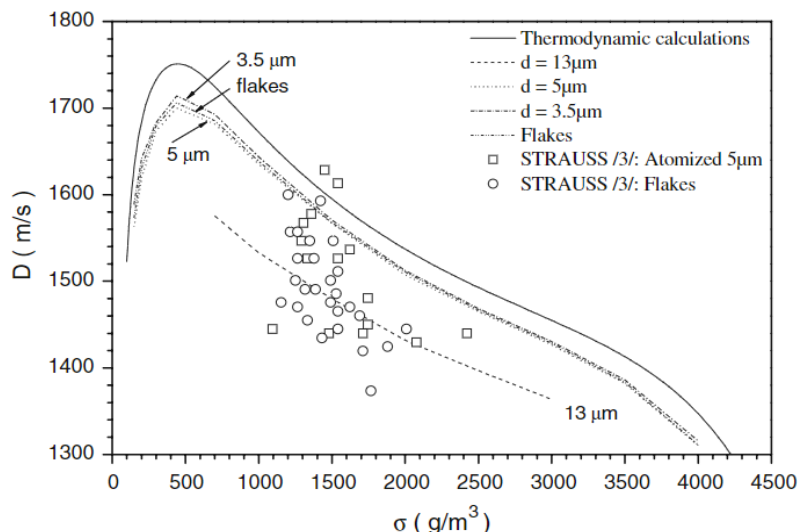


Образование субокислов Al_2O_2 и Al_2O обсуждается в работах Васильев и др., 1980, Kwon Y.-S. et al (2003), Huang Y. et al (2009), Starik A.M. et al, (2014).

Определение интегрального тепловыделения по экспериментальным и расчетным данным зависимости скорости детонации от загрузки частиц

$$E_2 = c_{v2}T_2 + 0.5(u_2^2 + v_2^2) + Q$$

$$Q = Q(\xi_0)$$



Veyssiere B., Khasainov B.A., Briand A. (2008)

Начальная концентрация частиц (ξ_0)	Скорость детонации (D / м/мс)	Тепловыделение (Q / Мдж/кг)
0.2	1.66	10.9
0.3	1.69	7.7
0.4	1.67	5.7
0.5	1.61	4.2
0.55	1.6	3.5

В экспериментах по детонации алюминия в воздухе и кислороде отмечено, что скорость детонации зависит от массовой концентрации и практически не зависит от размера частиц.



Модель приведенной кинетики горения частиц алюминия

$$J = \begin{cases} (\rho_2 - \rho_k) / \tau_\xi, & T_2 \geq T_{ign}, \rho_2 > \rho_k \\ 0, & T_2 < T_{ign}, \\ 0, & \rho_2 \leq \rho_k \end{cases}$$

Температурный критерий воспламенения, Федоров А.В. (1986, 1992).

Неполное сгорание частиц, Strauss W.A. (1968)

$$T_{ign} = 900 \div 930\text{K}$$

**Микроразмерные частицы
от 3.5 мкм до 10 мкм**

$$\tau_\xi \sim d^2 \exp(E_a / RT_2)$$

$$E_a = 32 \text{ кДж/моль}$$

**Микроразмерные частицы
до 3.5 мкм**

$$\tau_\xi \sim d^{0.3} \exp(E_a / RT_2)$$

**Субмикронные
частицы от 150 нм
до 1 мкм**

$$\tau_\xi \sim d^{0.3} p^{-m} \exp(E_a / RT_1)$$

$$m = -0.25 \ln d [\text{мкм}]$$

$$E_a = (32 - 14 \ln d [\text{мкм}]) \text{ кДж/моль}$$

Наноразмерные частицы до 150 нм

$$\tau_\xi \sim d^{0.3} p^{-0.5} \exp(E_a / RT_1) \quad E_a = 60 \text{ кДж/моль}$$

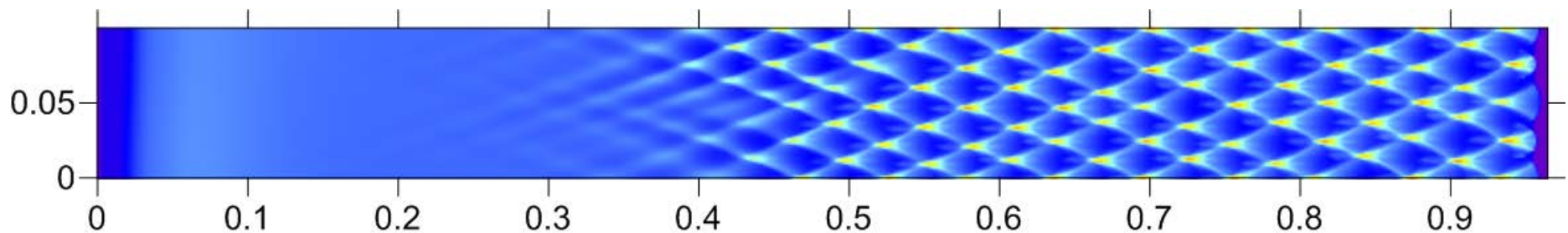


Ячеистая детонация в монодисперсных газозвесах микроразмерных частиц

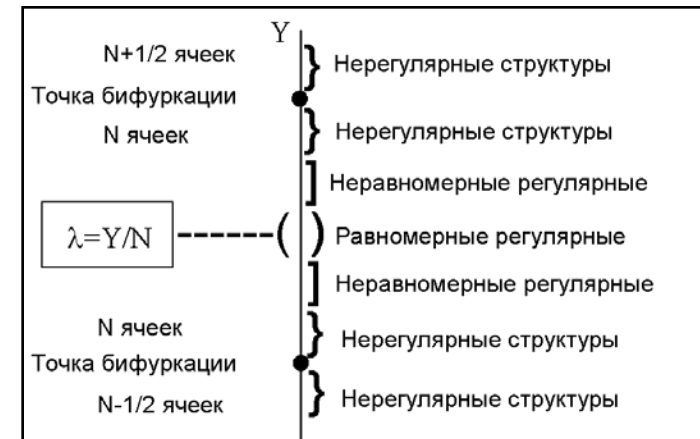
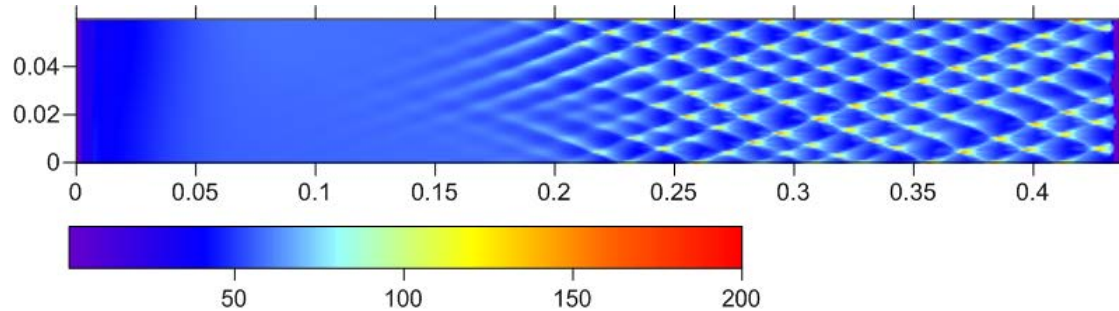
Формирование ячеек из малых возмущений при распространении детонации в плоском канале

$$E_a = 32 \text{ kJ/mol}$$

$d=2 \text{ мкм}$ ($p_{\text{max}}=158 \text{ атм}$)



$d=1 \text{ мкм}$ ($p_{\text{max}}=162 \text{ атм}$)

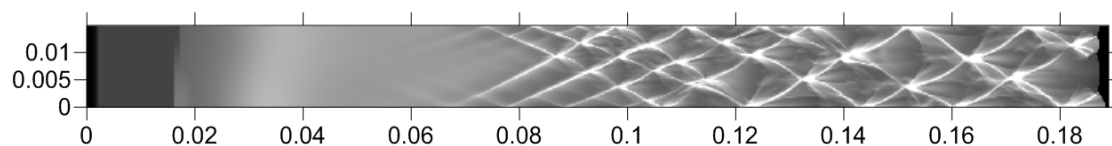


В микроразмерных взвесах ячеистые структуры регулярны и равномерны при соответствии ширины канала кратному числу «натуральных» ячеек. В равномерных структурах пиковые давления в тройных точках максимальны (около 160 атм).

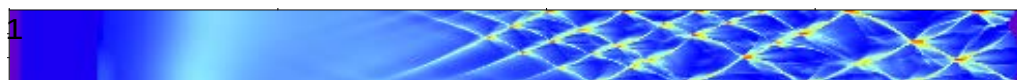


Ячеистая детонация в монодисперсных газозвесах наноразмерных частиц

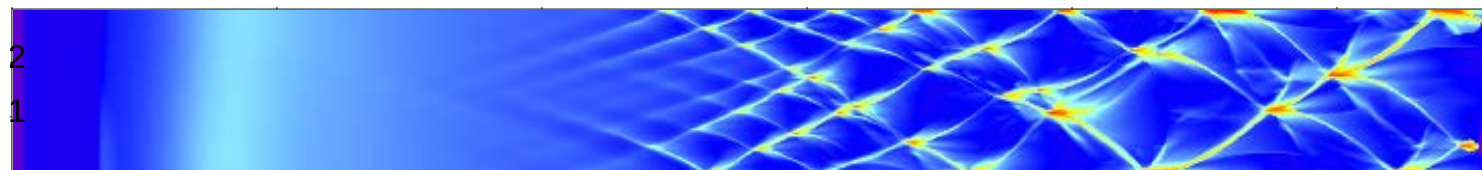
Картини максимальных давлений ячеистой детонации наноразмерных взвесей



80 nm (563 атм)



100 nm (572 атм)



200 nm
(638 атм)

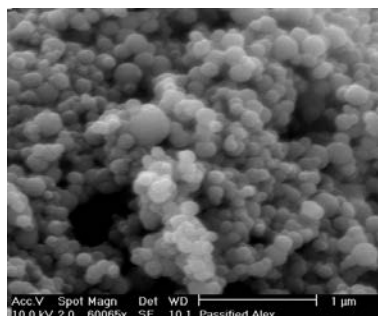
Ячеистые структуры в наноразмерных взвесах являются слаборегулярными и нерегулярными, что обусловлено высокими значениями энергии активации реакции горения. Отмечается укрупнение ячеек в сравнении с микроразмерными взвесями (хотя в волнах ЧЖ зоны воспламенения и горения сокращаются) и увеличение пиковых давлений до более чем 600 атм.



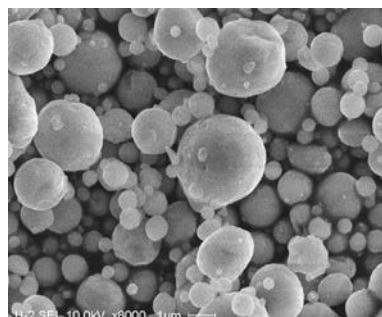
Сравнение с данными экспериментов по детонации порошков алюминия

Эксперименты по спиновой детонации воздушных взвесей алюминия F. Zhang 2006, 2008)

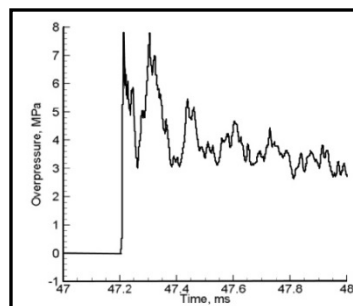
Монодисперсный порошок наноразмерных частиц (100 нм)



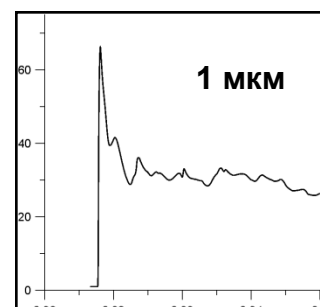
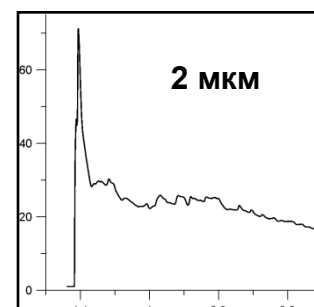
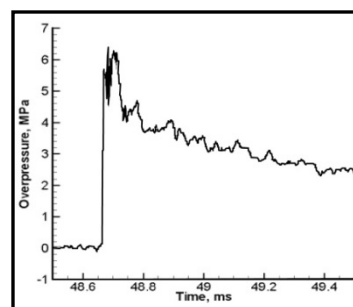
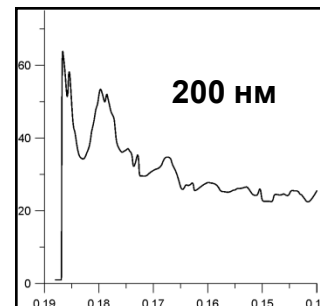
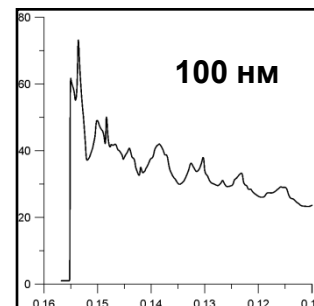
Полидисперсный порошок микроразмерных частиц (средний размер 1.6 мкм)



Эксперимент



Расчеты

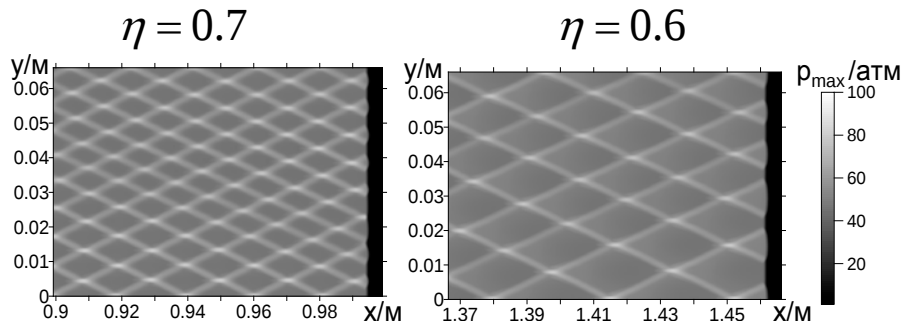


Различия в амплитудах пульсаций давления за фронтом детонации в экспериментах с микроразмерными и наноразмерными порошками воспроизводятся в расчетах (монодисперсные взвеси в кислороде, 2-D расчеты в плоских каналах).
Дополнительным фактором сглаживания пульсаций является полидисперсность.

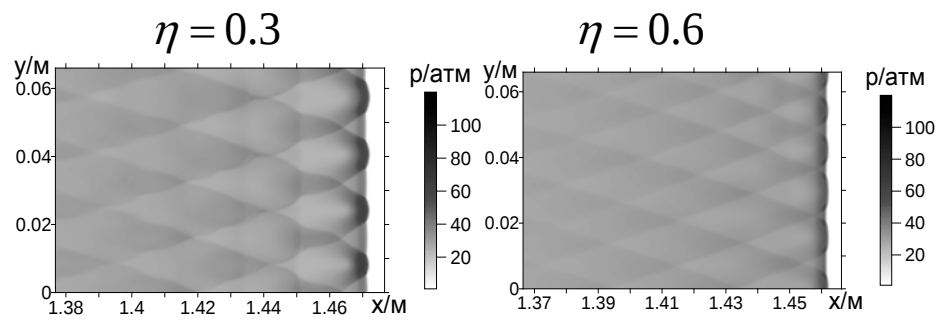


Особенности ячеистой детонации бидисперсных микроразмерных взвесей

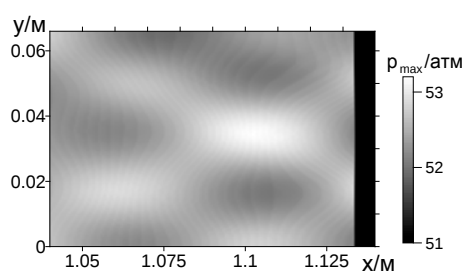
Вырождение ячеистой детонации в бидисперсных смесях 1 мкм и 2 мкм



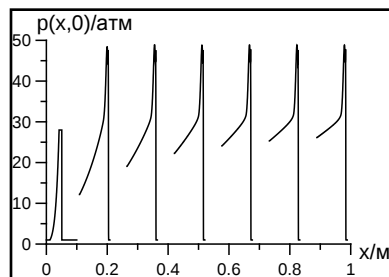
Спрямление траекторий тройных точек



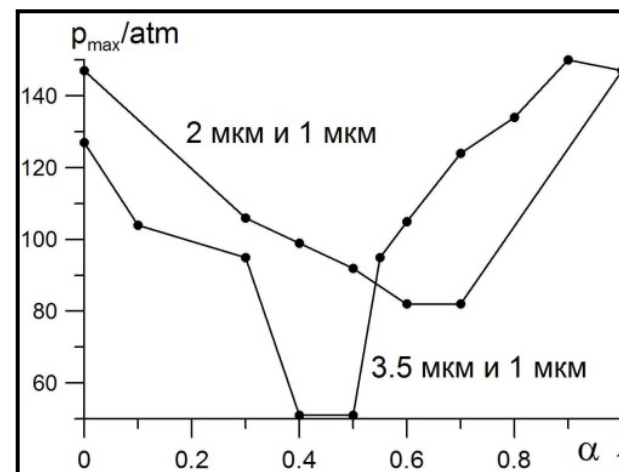
Выпрямление фронта ячеистой детонации



3.5 мкм и 2 мкм $\eta = 0.5$



3.5 мкм и 1 мкм $\eta = 0.5$



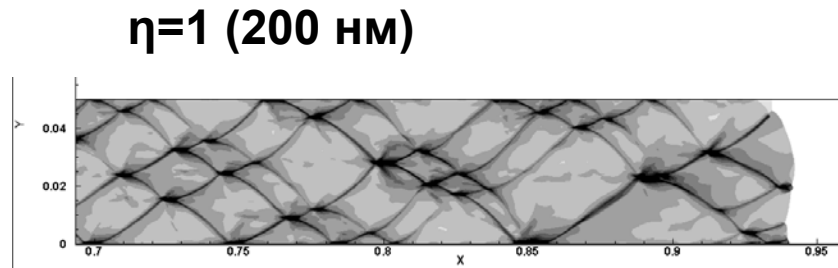
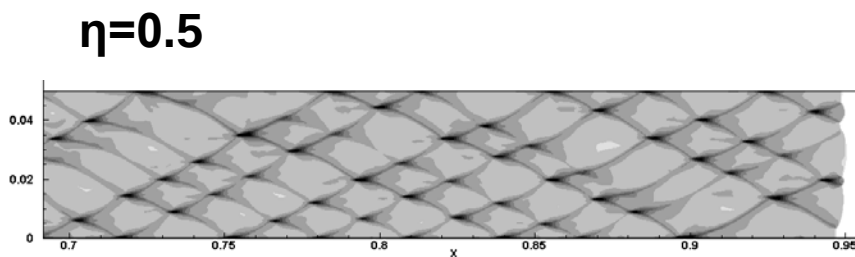
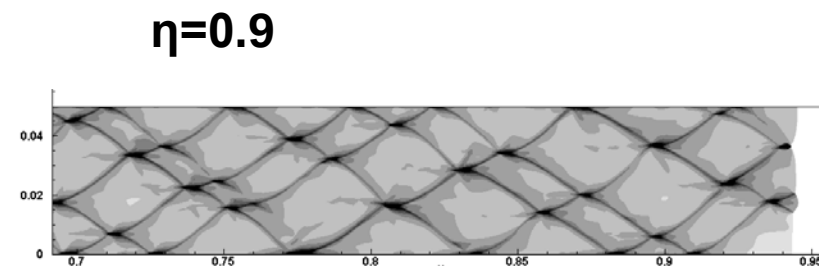
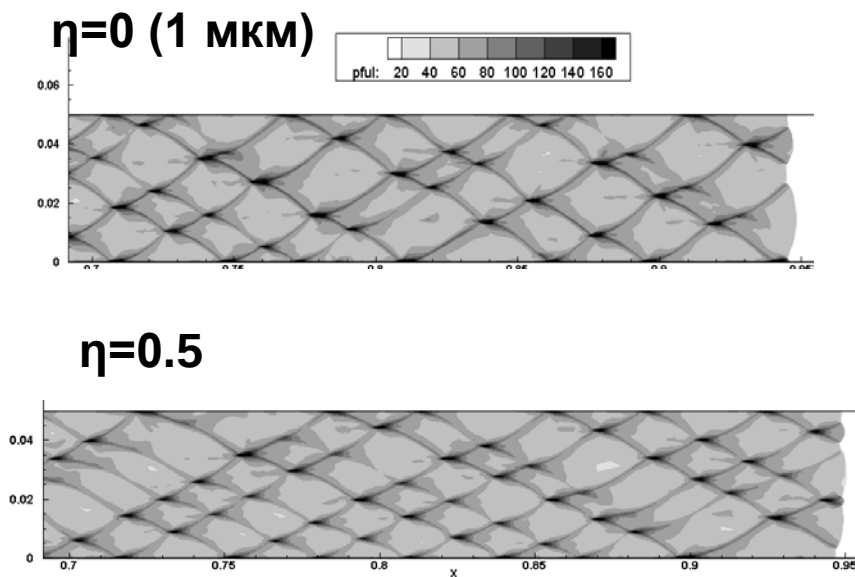
Зависимости пиковых давлений
от доли мелкой фракции

**В бидисперсных взвешах имеет место
вырождение ячеистой детонации вплоть
до устойчивой плоской волны ЧЖ.
Пиковые давления уменьшаются.**



Детонация в бидисперсных взвесях субмикронных и наноразмерных частиц

Картинки ячеистой детонации бидисперсных взвесей 1 мкм и 200 нм



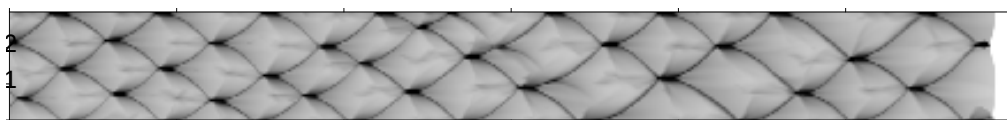
В бидисперсных смесях микроразмерных и наноразмерных частиц с изменением параметра насыщенности происходит изменение характера структур и размера ячейки. Увеличение доли наноразмерных частиц приводит к нерегулярности и укрупнению ячейки. Вырождения ячеистой детонации при средних значениях параметра насыщенности здесь не наблюдается.



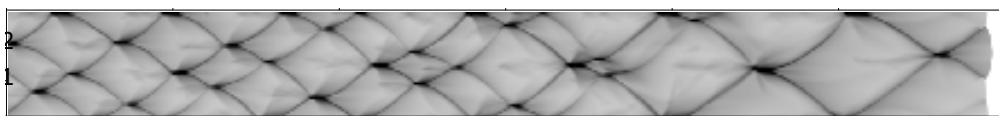
Ячеистая детонация в бидисперсных взвесах наноразмерных частиц

Картинки ячеистой детонации бидисперсных взвесей 400 нм и 200 нм

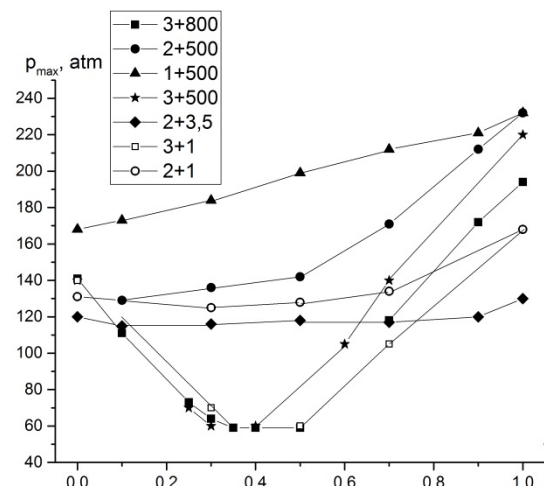
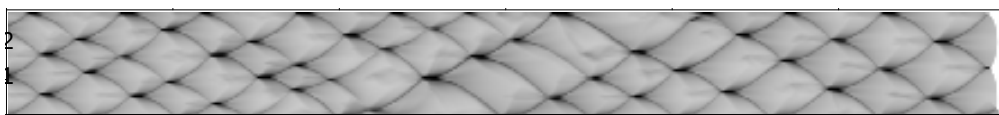
$\eta=0.1$ (10% 400 нм)



$\eta=0.5$



$\eta=0.9$ (10% 200 нм)



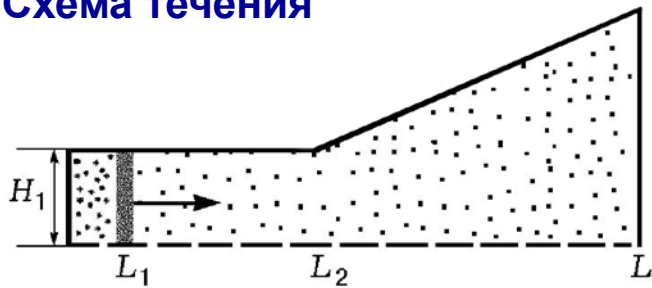
Зависимости пиковых давлений от параметра насыщенности бидисперсных взвесей

В бидисперсных смесях наноразмерных частиц характер структур одинаков при всех значениях параметра насыщенности. Размер ячейки может меняться, наблюдаются переходные структуры. Вырождения ячеистой детонации, свойственного микроразмерным бидисперсным взвесям, не происходит.

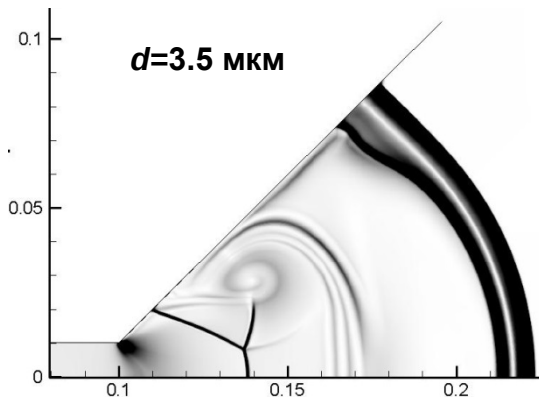


Распространение детонации в каналах с линейным расширением

Схема течения

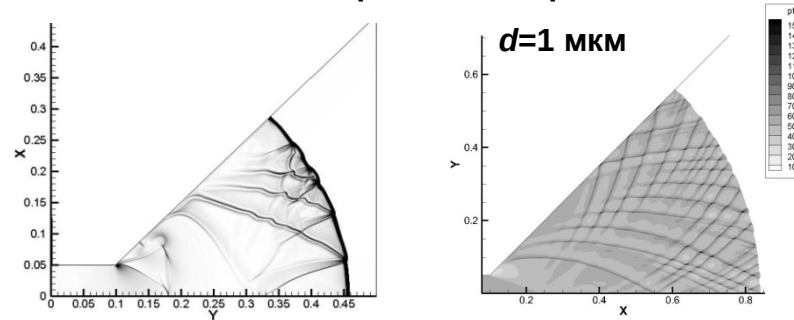


Режим со срывом детонации:

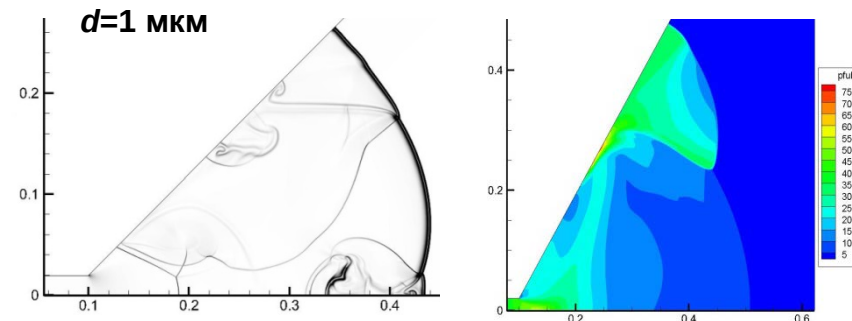


Режимы распространения (микродисперсные взвеси):

Закритический режим



Критические режимы



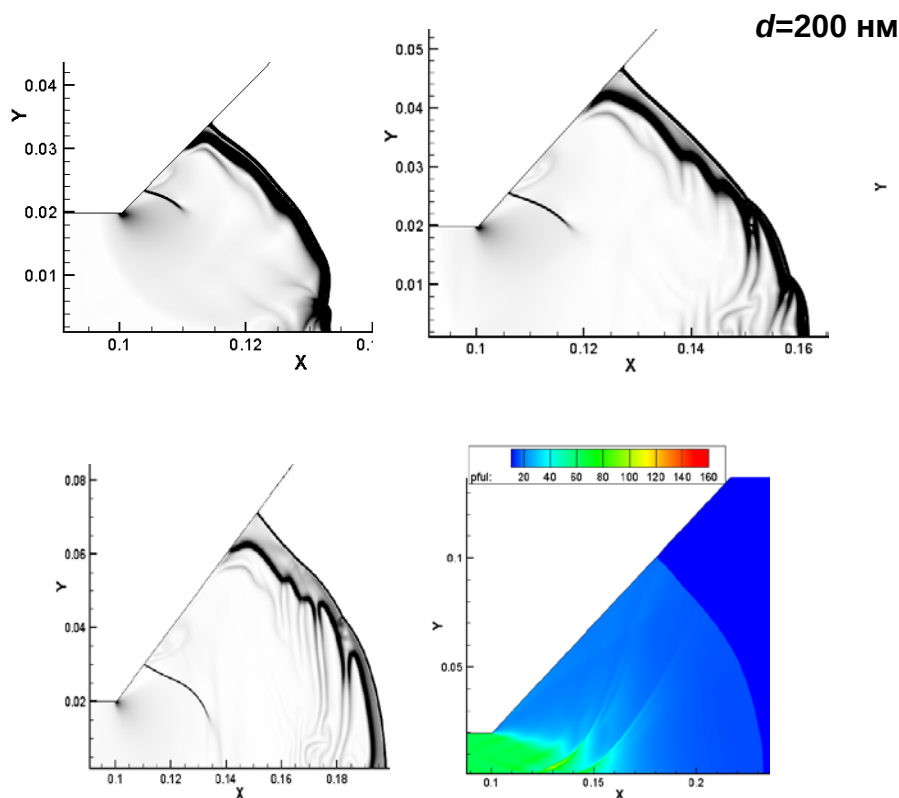
Картины течения в линейно расширяющемся канале подобны картинам за прямоугольным уступом. Аналогично реализуются те же режимы распространения: критический и закритический и режим со срывом детонации (докритический).



Распространение детонации в каналах с линейным расширением

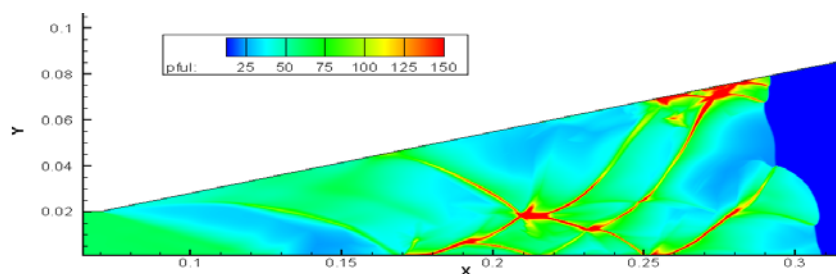
Нанодисперсные взвеси частиц алюминия

Режим со срывом детонации:

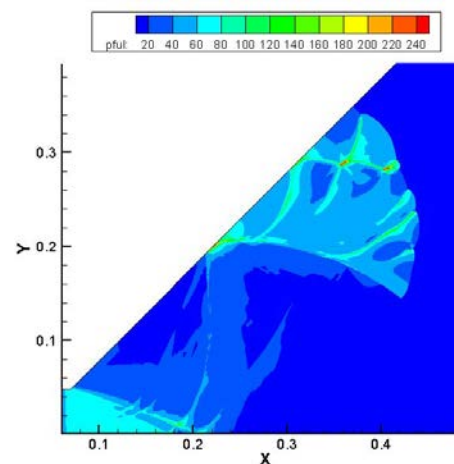


Режимы с распространением:

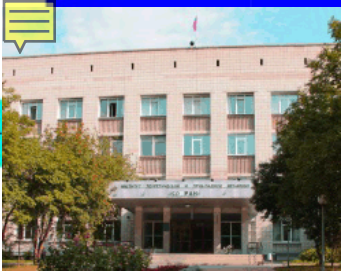
Закритический режим



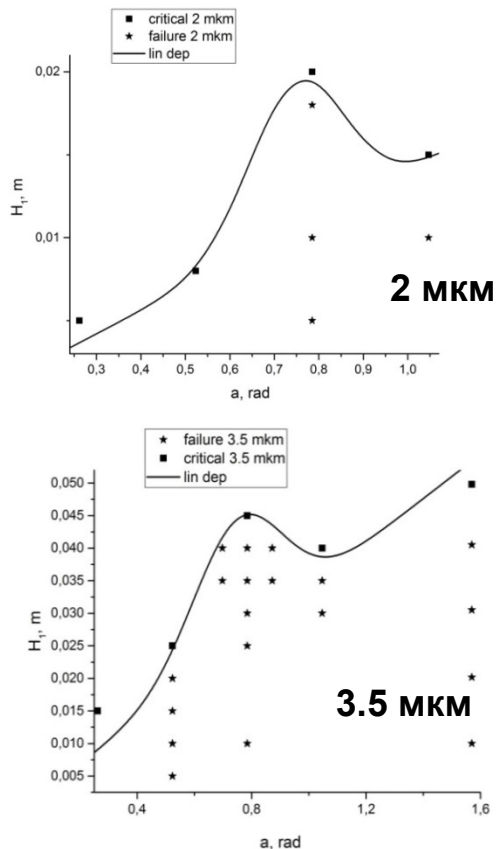
Критический режим



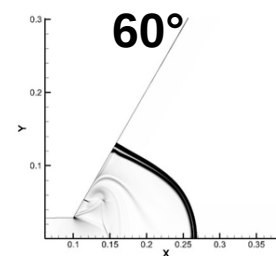
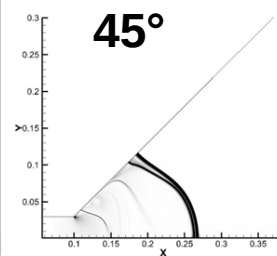
В взвесьях наноразмерных частиц проявляется неустойчивость фронта горения, нерегулярность поперечных волн и обширные зоны частичного срыва детонации в критических режимах.



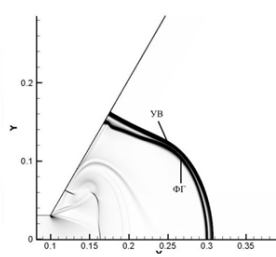
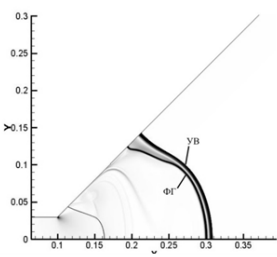
Критические условия распространения (микродисперсные взвеси)



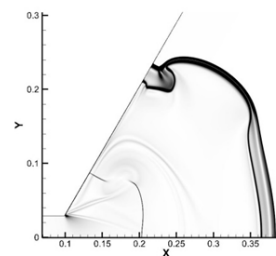
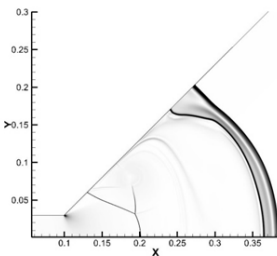
а) 0,16 мс



б) 0,24 мс

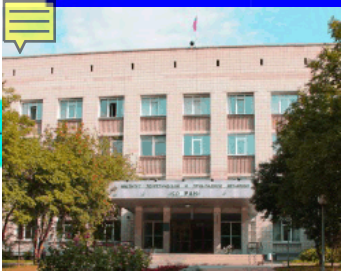


в) 0,3 мс

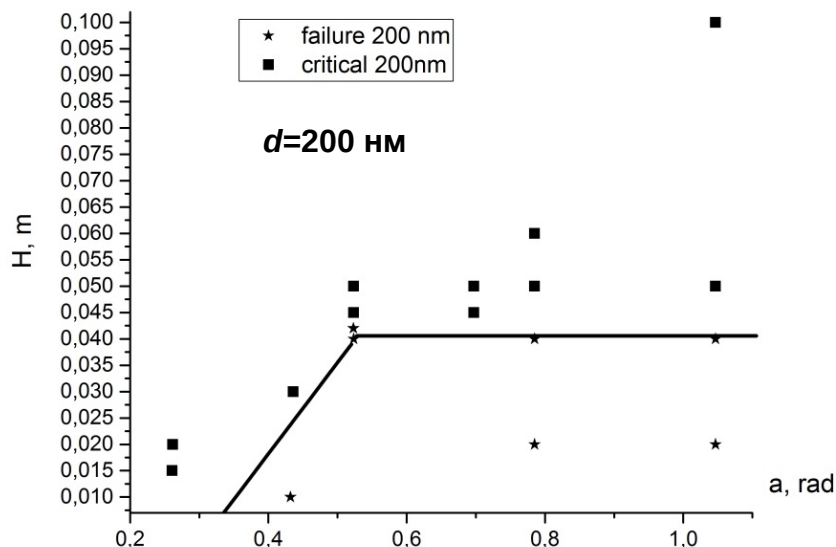


Волновые картины для двух углов в зоне изгиба

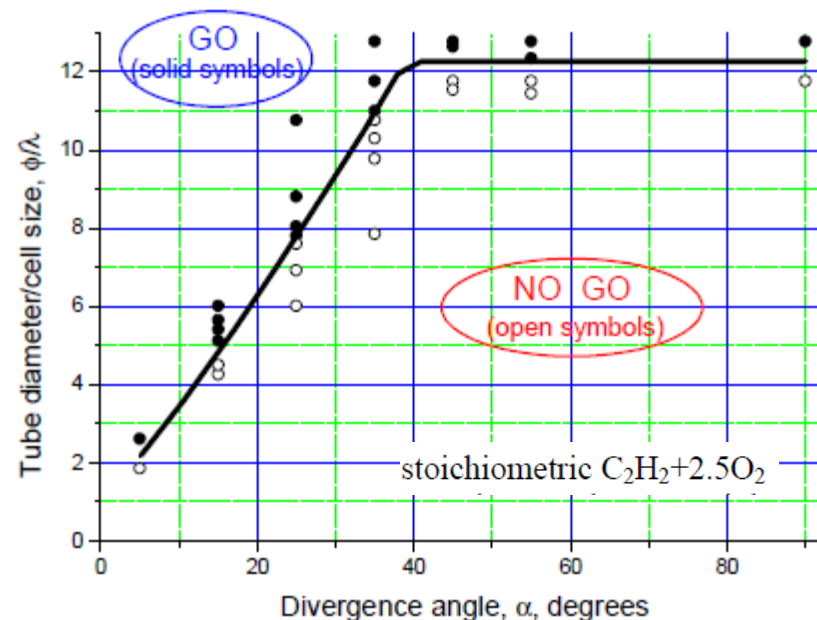
Для микронных частиц установлена немонотонная зависимость критической ширины от угла расширения. Изгиб в среднем интервале углов расширения (от 40° до 50°) связан с влиянием релаксационных процессов на условия ре-инициирования при смене Маховской конфигурации в течении за углом расширения.



Критические условия распространения (нанодисперсные взвесы)



Режимы и критические условия распространения детонации в канале с линейным расширением в газовзвеси частиц 200 нм



Экспериментальные и расчетные данные по выходу газовой детонации из трубы в конус (Khasainov et al, Shock Waves, 2005)

Для наноразмерных частиц установлена аналогичная газовой детонации монотонная зависимость критической ширины от угла расширения, состоящая из двух линейных участков. Излом соответствует смене Маховской конфигурации в течении за уступом.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами численного моделирования двумерных детонационных течений в газовзвесах частиц алюминия установлены следующие отличия микродисперсных взвесей от нанодисперсных:

- В ячеистой детонации микродисперсных порошков алюминия ячейки регулярны. Ячеистая детонация нанопорошков характеризуется нерегулярностью ячеистых структур, что обусловлено высоким значением энергии активации приведенной реакции горения. Пиковые давления при этом значительно возрастают (до 600 атм).
- В бидисперсных смесях микроразмерных частиц наблюдались случаи вырождения ячеистой детонации и устойчивое распространение плоских волн ЧЖ. Пиковые давления детонации полидисперсных порошков могут уменьшиться до значений ЧЖ. При доле средней фракции полидисперсных взвесей менее 0.4 ячеистая детонация вырождается в плоскую волну ЧЖ (поперечные волны не образуются либо быстро затухают). В бидисперсных смесях наноразмерных частиц поперечные волны ячеистой детонации присутствуют всегда, пиковые давления меняются монотонно с изменением параметра насыщенности.
- Картины течений и критические условия распространения при выходе детонации в канал с расширением для микродисперсных и нанодисперсных взвесей различаются. Зависимости критической ширины от угла расширения в микродисперсных взвесах немонотонны, а в нанодисперсных – монотонны, состоят из двух линейных участков и полностью соответствует аналогичным зависимостям в газовой детонации.



Спасибо за внимание!