

XVII Международная конференция
«ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ»
Снежинск, Россия
19–23 мая 2025 г.

**Физико-математическое
моделирование распространения
гетерогенной детонации по слою
газовзвеси частиц алюминия**

Лаврук С.А., Афанасенков А.А.

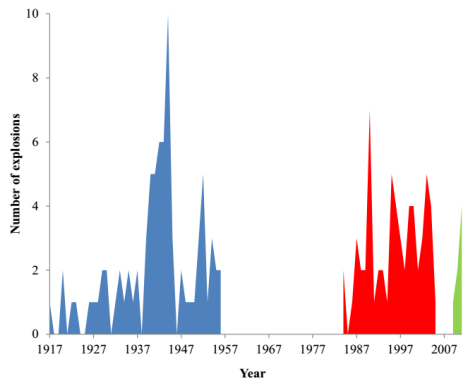
ИТПМ СО РАН



Актуальность

Интерес к изучению механизмов горения частиц алюминия связан с участвовавшими количеством несчастных случаев на производствах, где происходит изготовление и обработка алюминиевых изделий, в частности авиационная, автомобильная и химическая промышленности.

Разработка приведенных моделей актуально с точки зрения быстродействия реализуемых расчетов.



Количество взрывов
металлической пыли по годам



Фильтр до и после взрыва
алюминиевой пыли

Цель работы

- Тестирование приведенной кинетики детонационного горения частиц алюминия;
- Исследование распространения детонации в канале, где часть канала заполнена горючей смесью алюминия в воздухе.

Физико-математическая модель

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

Уравнения Эйлера для описания слабозапыленной реагирующей среды

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{W}_2 \\ \mathbf{W}_3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \mathbf{F}_3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}_1 \\ \mathbf{\Gamma}_2 \\ \mathbf{\Gamma}_3 \end{pmatrix}$$

Индексы:

1 – газ,
2 – частицы алюминия,
3 – наноразмерные
частицы оксида
алюминия

$$\rho_i = \rho_{ii} m_i \quad m_1 = 1 - m_2 - m_3$$

$$\rho_{22} = \text{const} \quad \rho_{33} = \text{const}$$

$$E_2 = c_2 T_2 + 0.5(u_2^2 + v_2^2) + Q_{23}$$

$$E_3 = c_3 T_3 + 0.5(u_3^2 + v_3^2)$$

Газовая фаза

$$W_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_{O_2} \\ \rho_{Alox} \\ \rho_{N_2} \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_1 E_1 \end{pmatrix} \quad F_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ \rho_{O_2} u_1 \\ \rho_{Alox} u_1 \\ \rho_{N_2} u_1 \\ p + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p u_1 \end{pmatrix} \quad G_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_{O_2} v_1 \\ \rho_{Alox} v_1 \\ \rho_{N_2} v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p + \rho_1 v_1^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p v_1 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_1 = -(\Gamma_2 + \Gamma_3)$$

$$R = \frac{R_{un}}{\rho_1} \left(\frac{\rho_O}{\mu_O} + \frac{\rho_{Alox}}{\mu_{Alox}} + \frac{\rho_N}{\mu_N} \right) \quad p = \rho_1 R T_1$$

$$E_1 = \frac{(u_1^2 + v_1^2)}{2} + c_{v,1} T_1 + \xi_{Alox} Q_{Alox}$$

Частицы алюминия и оксида алюминия

$$W_i = \begin{pmatrix} \rho_i \\ \rho_i u_i \\ \rho_i v_i \\ \rho_i E_i \end{pmatrix} \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho_i u_i \\ \rho_i u_i^2 \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i u_i E_i \end{pmatrix} \quad G_i = \begin{pmatrix} \rho_i v_i \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i v_i^2 \\ \rho_i v_i E_i \end{pmatrix} \quad i=2,3;$$

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} -(J_{2Al_2O_3} + J_{2Alox}) \\ f_{2x} - (J_{2Al_2O_3} + J_{2Alox}) u_2 \\ f_{2y} - (J_{2Al_2O_3} + J_{2Alox}) v_2 \\ q_2 + f_{2x} u_2 + f_{2y} v_2 - (J_{2Al_2O_3} + J_{2Alox}) E_2 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_3 = \begin{pmatrix} J_{2Al_2O_3} \\ f_{3x} + J_{2Al_2O_3} u_3 \\ f_{3y} + J_{2Al_2O_3} v_3 \\ q_3 + f_{3x} u_3 + f_{3y} v_3 + J_{2Al_2O_3} E_3 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = \frac{(u_2^2 + v_2^2)}{2} + c_{v,2} T_2 + Q_{23} \quad E_3 = \frac{(u_3^2 + v_3^2)}{2} + c_{v,3} T_3$$

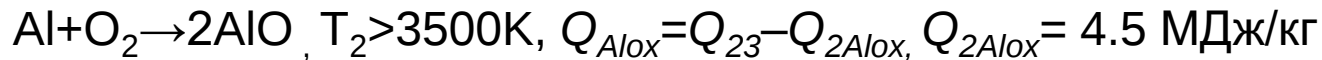
Реакция горения частиц алюминия

Допущения: $\mu_{AlOx} = \text{const} = \mu_{O_2}$ $Q_{23} = Q_{\max}$

$$J_2 = \begin{cases} 0, T_2 < T_{ign} \\ \frac{1}{\tau_{20}} \rho_2 (d_0 / d_2)^\theta \exp(-E_a / R_{un} T_2), T_2 > T_{ign}, \rho_O > 0 \end{cases}$$

$$J_{2AlOx} = \begin{cases} 0, T_1 < 3500K \\ J_2 (1 + \mu_{O_2} / 2\mu_{Al}), T_1 \geq 3500K \end{cases}$$

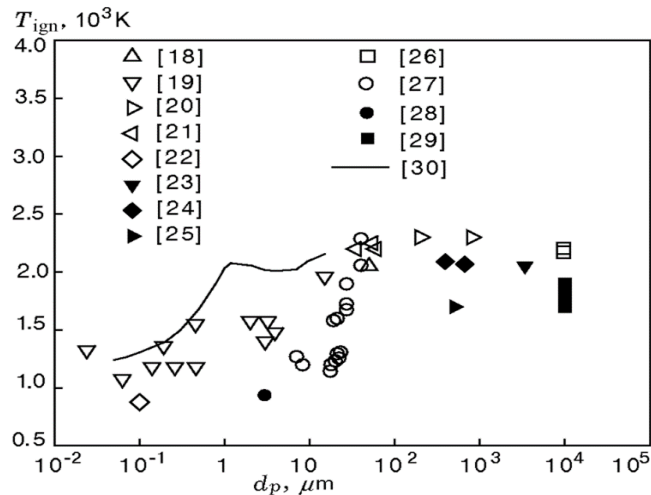
$$J_{2Al_2O_3} = \begin{cases} J_2 (1 + 3\mu_{O_2} / 4\mu_{Al}), T_1 < 3500K \\ 0, T_1 \geq T_{3e} \end{cases}$$



Воспламенение и горение частиц алюминия в условиях детонации

Температура воспламенения
микроразмерных частиц в
динамических условиях в УВ

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



Межфазные взаимодействия

$$\vec{f}_i = \frac{3m_i\rho_{11}}{4d_i} c_{Di} |\vec{u}_1 - \vec{u}_i| (\vec{u}_1 - \vec{u}_i)$$

$$q_i = \frac{6m_i\lambda_1}{d_i^2} \text{Nu}_i (T_i - T_1)$$

Закон сопротивления частиц в сверхзвуковом потоке

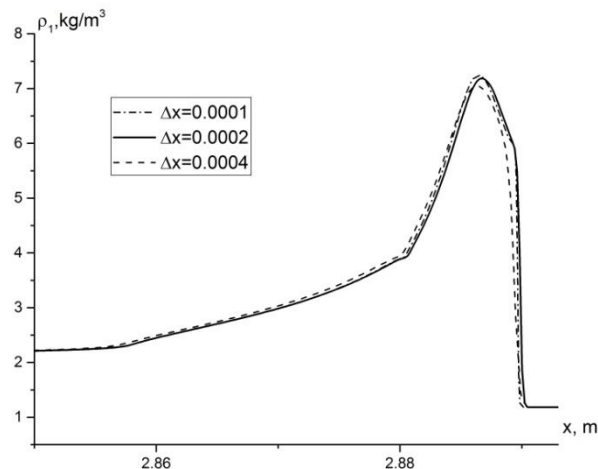
(Бойко В.М., Папырин А.Н. и др., 1997)

$$c_{Di}(\text{Re}_i, M_{1i}) = (1 + \exp(-\frac{0.43}{M_{1i}^{4,67}}))(0.38 + \frac{24}{\text{Re}_i} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}_i}})$$

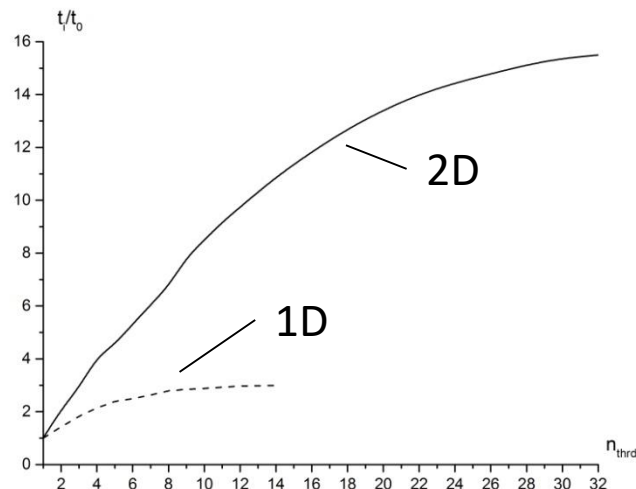
$$\text{Re}_i = \frac{\rho_{11}d_i |\vec{u}_1 - \vec{u}_i|}{\mu_1} \quad M_{1i} = \frac{|\vec{u}_1 - \vec{u}_i| \sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 P}} \quad \text{Nu}_i = 2 + 0.6 \text{Re}_i^{1/2} \text{Pr}^{1/3}$$

Численная технология и тестирование алгоритма

Численная технология основана на применении схемы TVD Хартена-Лакса для газовой фазы и схемы Джентри-Мартина-Дэйли



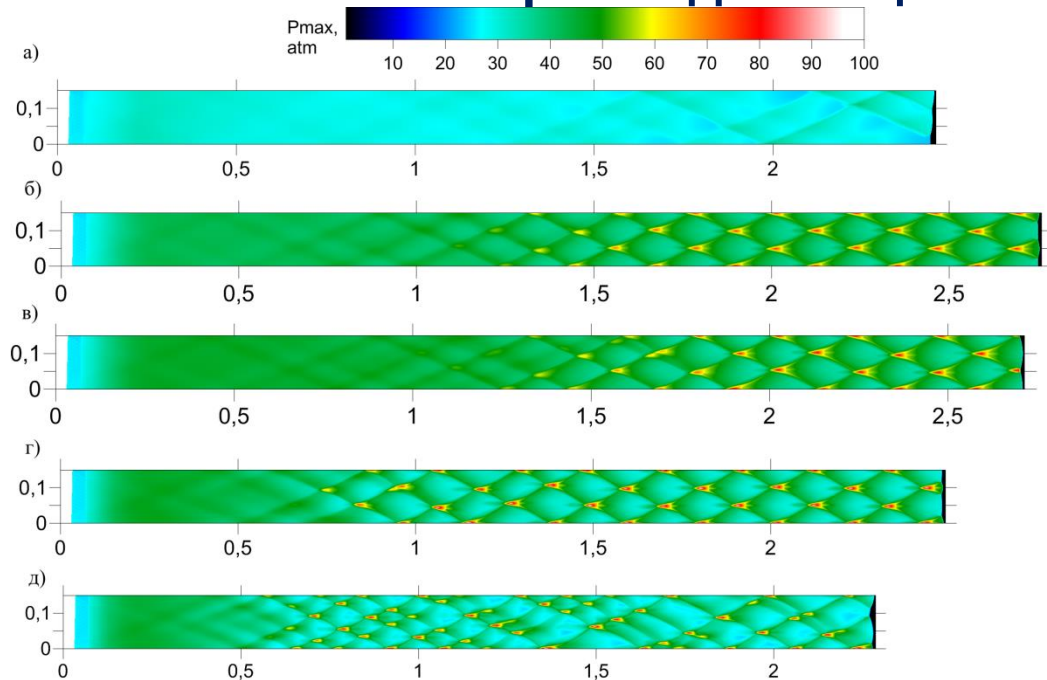
Тестирование сходимости численной схемы



Зависимость времени счета тестовой задачи от количества потоков при использовании библиотеки OpenMP.

ТЕСТИРОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ

Скорость детонационной волны



$\rho_2=150 \text{ г/м}^3$ $D=1.51 \text{ км/с}$

$\rho_2=300 \text{ г/м}^3$ $D=1.66 \text{ км/с}$

$\rho_2=450 \text{ г/м}^3$ $D=1.63 \text{ км/с}$

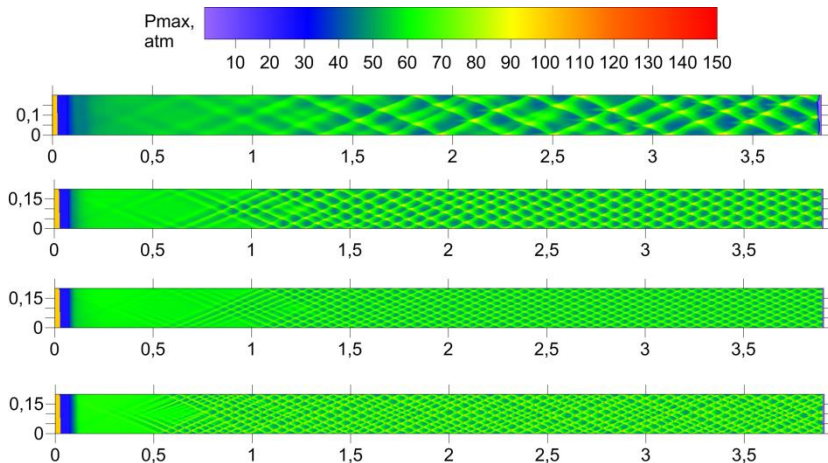
$\rho_2=600 \text{ г/м}^3$ $D=1.48 \text{ км/с}$

$\rho_2=750 \text{ г/м}^3$ $D=1.35 \text{ км/с}$

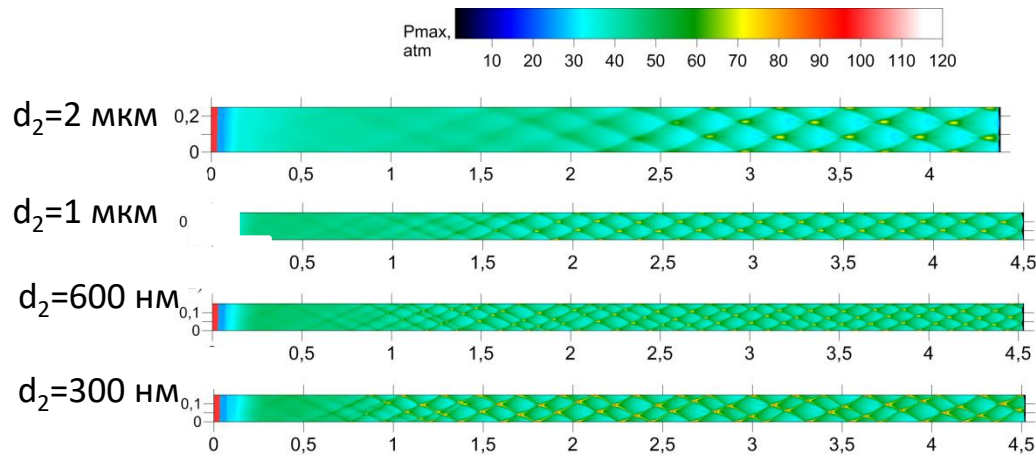
С увеличением загрузки частиц происходит сохранение давления в поперечных волнах на уровне 45-55 атм и снижение давления вне поперечных волн с 40 атм для $\rho_2=300 \text{ г/м}^3$ до 25 атм для $\rho_2>600 \text{ г/м}^3$

ТЕСТИРОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ

Размер детонационной ячейки



алюминий-кислород $\rho_2 = 1.3 \text{ кг/м}^3$

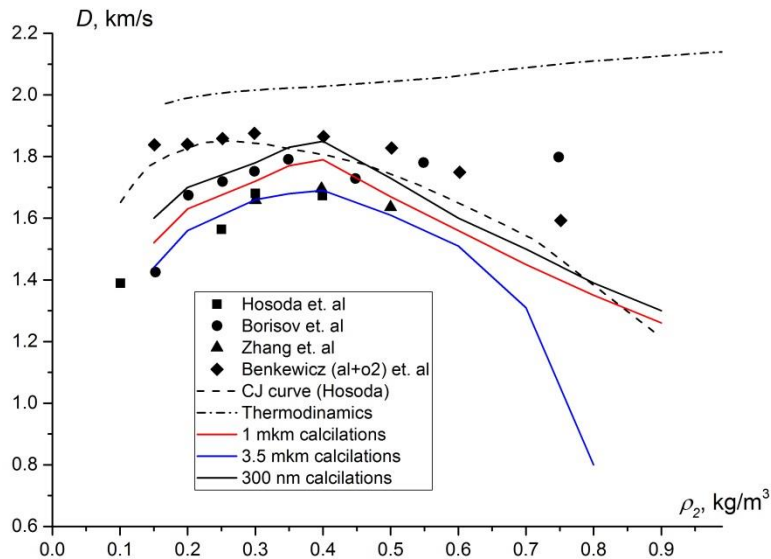


алюминий- воздух $\rho_2 = 450 \text{ г/м}^3$

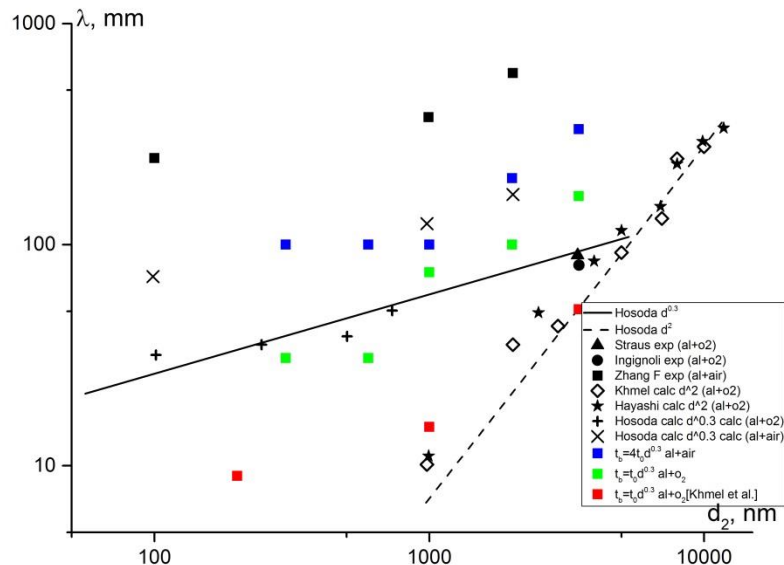
Давление в тройных точках колеблется в диапазоне 100-110 атм. Расчеты подтверждают данные других авторов, что на размер детонационной ячейки влияет размер частиц. Для субмикронного диапазона частиц ячеистая структура может становиться нерегулярной

Тестирование математической модели гетерогенной детонации

Скорость детонационной волны



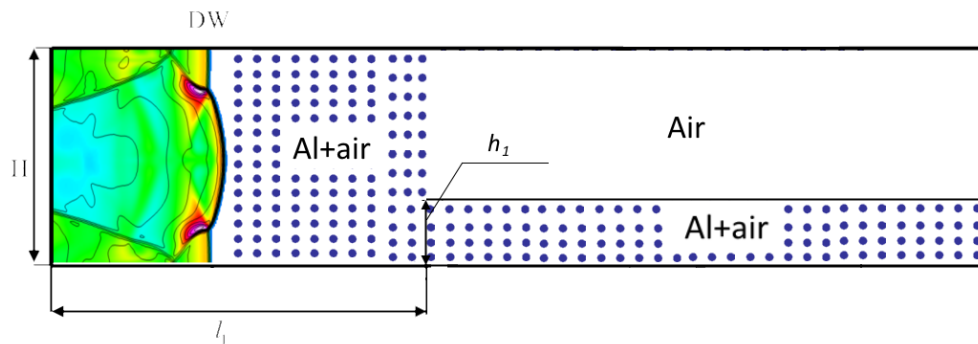
Размер детонационной ячейки



Влияние размера частиц на размер детонационной ячейки согласуется с экспериментальными и расчетными данными других авторов. Сравнение по скорости детонации для взвесей различной дисперсности и различной загрузки показало хорошее согласование с данными других авторов

Постановка задачи

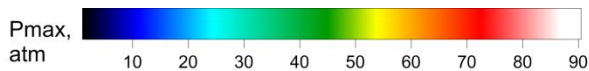
- Частицы алюминия диаметром $d_2 = 0.3, 1$ и 3.5 мкм; плотностью $\rho_2 = 200 \dots 800 \text{ г/м}^3$;
- В ходе исследования варьировалась высота слоя h_1



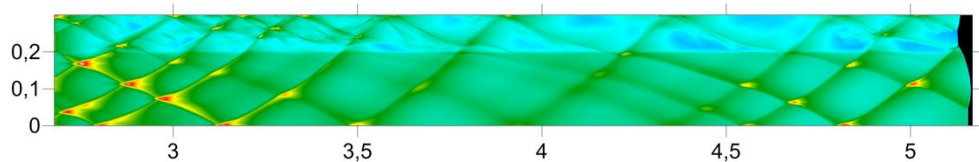
Расчетная схема

Режимы течения.

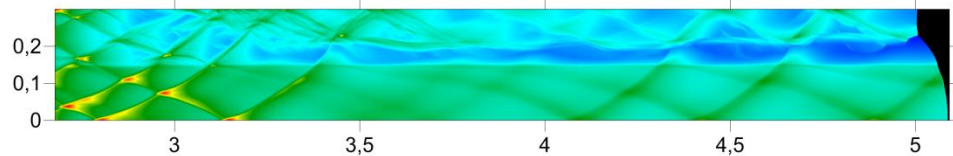
Варьирования высоты слоя реагирующей смеси



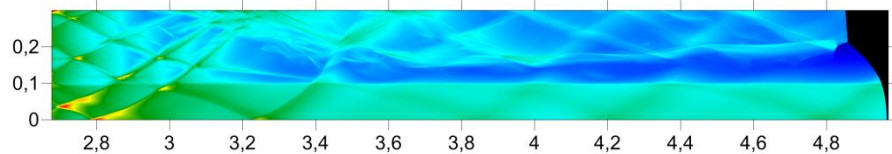
$$d_2 = 1 \text{ мкм}, \rho_2 = 450 \text{ г/м}^3$$



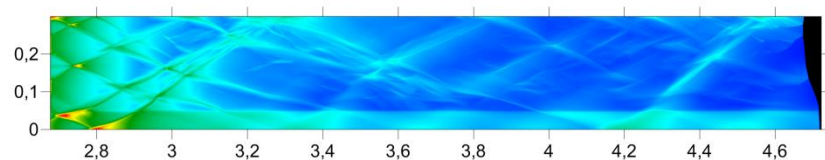
$$h_1 = 20 \text{ см}, D = 1.64 \text{ км/с}$$



$$h_1 = 15 \text{ см}, D = 1.64 \text{ км/с}$$



$$h_1 = 10 \text{ см}, D = 1.53 \text{ км/с}$$



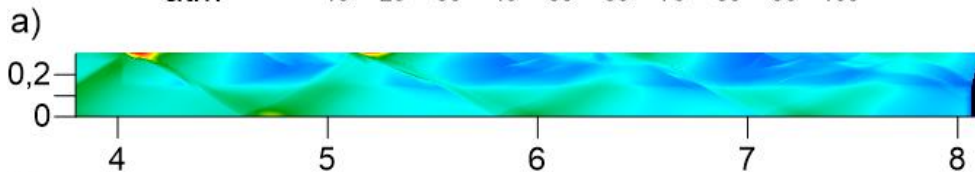
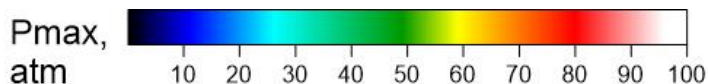
$$h_1 = 5 \text{ см}, D = 1.36 \text{ км/с}$$

С уменьшением размера высоты слоя смеси происходит уменьшение скорости фронта.

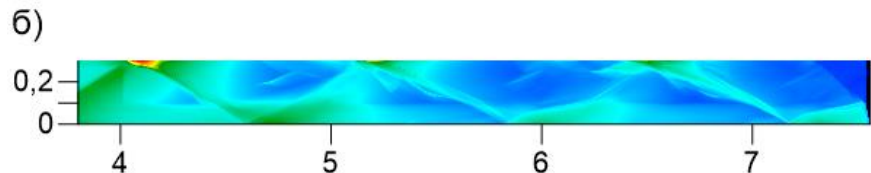
Режимы течения.

Варьирования высоты слоя реагирующей смеси

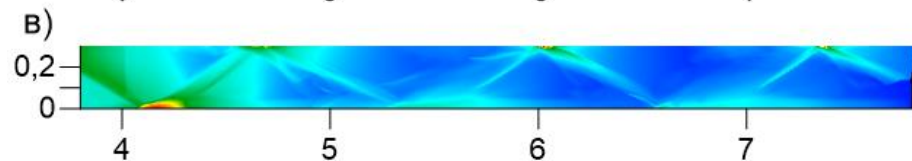
$$d_2=3.5 \text{ мкм}, \rho_2=450\text{г/м}^3$$



$$h_1=15 \text{ см}, D=1.55 \text{ км/с}$$



$$h_1=10 \text{ см}, D=1.4 \text{ км/с}$$

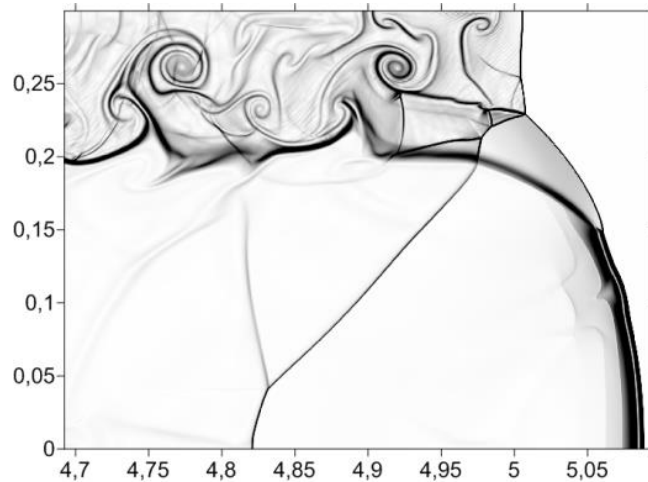


$$h_1=5 \text{ см}, D=1.3 \text{ км/с}$$

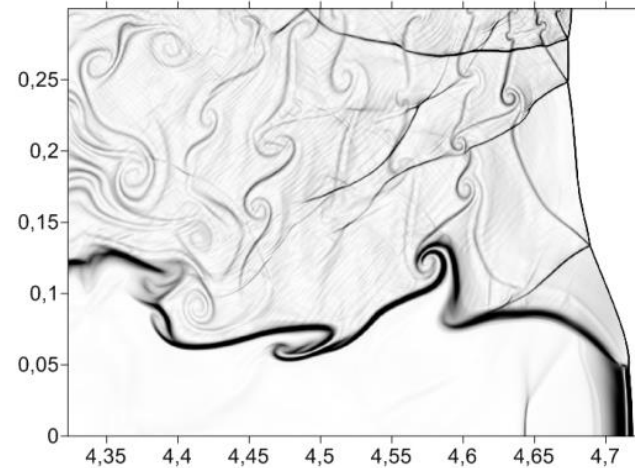
С уменьшением величины слоя происходит локальный срыв детонации и восстановление течения за счет сильной поперечной волны, распространяющейся по каналу.

Режимы течения.

Распространение детонации без срыва



$h_1 = 15\text{cm}$

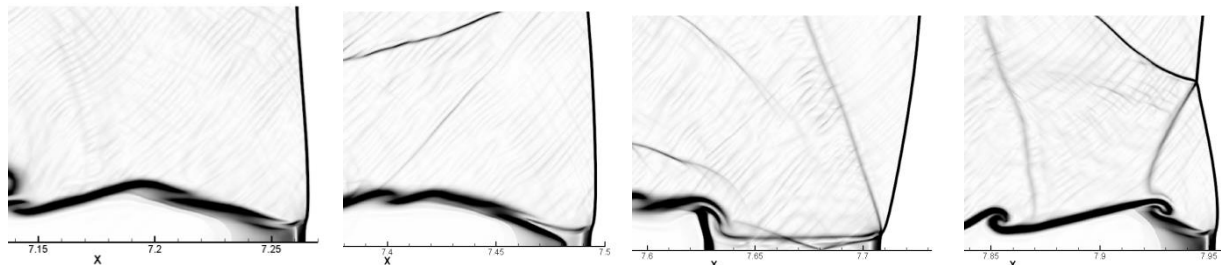


$h_1 = 5\text{cm}$

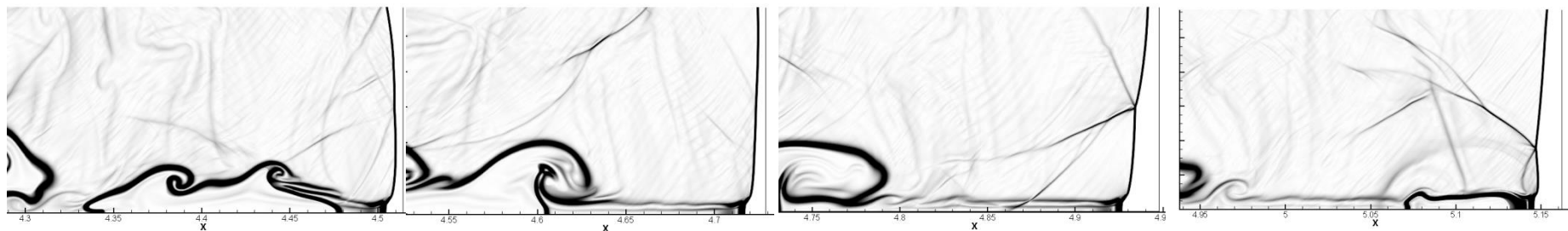
Видно, что для обоих случаев на границе раздела фаз образуется гибридная структура из неустойчивости Кельвина-Гельмгольца и Рихтмайера-Мешкова, с образованием грибообразных структур.

Режимы течения.

«Псевдодетонационное» распространение



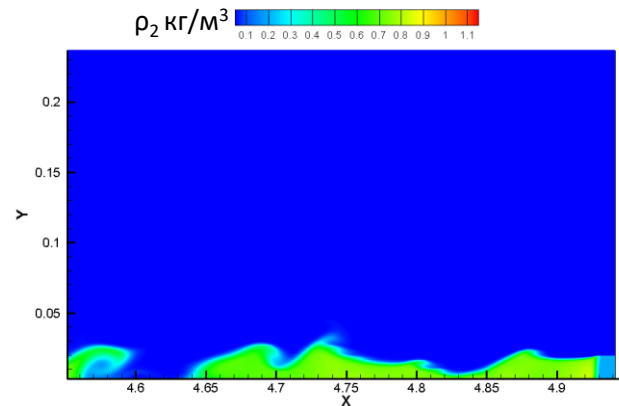
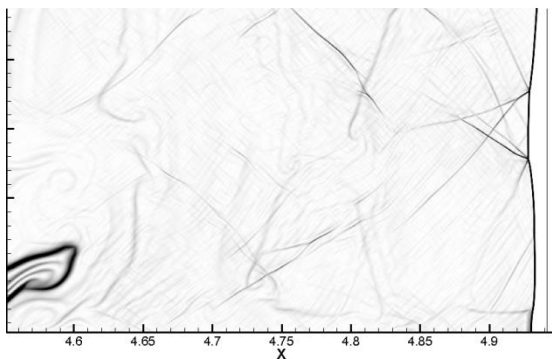
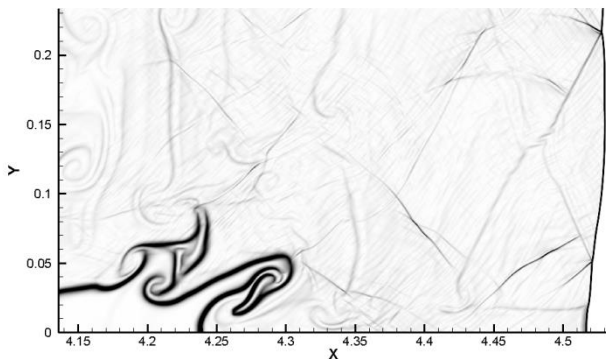
$h_1=1$ см, $D=1.14$ км/с
 $\rho_2=450$ г/м³



$h_1=1$ см, $D=1.08$ км/с $\rho_2=800$ г/м³

В ходе распространения происходит локальный срыв детонации с последующим реиницированием детонации от «маховской» конфигурации от ударной волны, распространяющейся в верхней части канала.

Режимы течения. Срыв детонации



$$h_1=2 \text{ см}, D=1.05 \text{ км/с } \rho_2=200\text{г/м}^3$$

За фронтом лидирующей ударной волны практически отсутствуют градиент плотности, на границе двух фаз. На профиле плотности видно, что частицы алюминия не сгорают за фронтом лидирующей ударной волны, а образуют р-слой и медленно реагируют за лидирующим фронтом. Плотность р-слоя не превышает 1.1 кг/м^3 , что близко к плотности газовой фазы.

Выводы

- Методами численного моделирования проведено тестирование приведенной кинетической схемы детонационного горения частиц алюминия в воздухе, которая учитывает образование газообразных субокислов алюминия и частиц конденсированного оксида алюминия.
- Проведено тестирование численного алгоритма с применением методов параллельного программирования на основе библиотеки OpenMP, показавшее ускорение до 16 раз на 30 потоках.
- Проведены расчеты двумерных течений ячеистой детонации взвесей алюминия в воздухе в плоском канале при различных размерах частиц и различной загрузки. Получено хорошее совпадение с данными других авторов.
- Получены критические условия распространения детонации при распространении детонации по слою частиц.
- Основной механизм восстановления детонации в рассмотренных случаях является отраженная от верхней стенки волна сжатия.
- Срыв детонации получен при критических значениях концентраций частиц.

Спасибо за внимание!