

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

# Влияние добавки частиц алюминия на характеристики детонации водородно-воздушных смесей

*Т.А. Хмель, А.А. Афанасенков*

Институт теоретической и прикладной механики  
им. С.А. Христиановича СО РАН

Новосибирск, Россия



## Актуальность

- ❑ Возросший интерес к различным режимам горения (в том числе детонационным) водородно-воздушных смесей как альтернативных источников энергии
- ❑ Изучение возможности использования добавок мелкодисперсных частиц алюминия для управления процессами горения и детонации водородно-воздушных смесей
- ❑ Необходимость развития и валидации достаточно простых физико-математических моделей для решения исследовательских и инженерных задач механики реагирующих гетерогенных сред

## Цели исследования

- ❑ Развитие физико-математической модели гибридной детонации в смесях реагирующих газов и мелкодисперсных частиц алюминия в рамках приведенной кинетики, согласованной с термодинамическими расчетами.
- ❑ Валидация модели по зависимости скорости гибридной детонации от загрузки частиц алюминия и по размерам детонационной ячейки.
- ❑ Исследование структур ячеистой детонации в бедных по водороду водородно-воздушных смесях с добавлением частиц алюминия.
- ❑ Анализ влияния загрузки частиц и их распределения в пространстве на параметры течения, характер и размер детонационной ячейки, режимы распространения в плоских и расширяющихся каналах.

# Физико-математическая модель

Физико-математическая модель основывается на уравнениях Эйлера, вытекающих из законов сохранения массы, импульса и энергии.

Учитываются взаимодействия между газом, частицами алюминия, наноразмерными частицами оксида алюминия.

Выделяются следующие газовые компоненты:  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$  и смесь газообразных продуктов горения алюминия ( $AlO$ ,  $AlOH$ ,  $Al_2O$ ,  $AlO_2$ ,  $Al_2O_2$ )

$$W_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_H \\ \rho_O \\ \rho_{H_2O} \\ \rho_{AlHO} \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_1 E_1 \end{pmatrix} \quad F_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ \rho_H u_1 \\ \rho_O u_1 \\ \rho_{H_2O} u_1 \\ \rho_{AlHO} u_1 \\ p + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p u_1 \end{pmatrix} \quad G_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_H v_1 \\ \rho_O v_1 \\ \rho_{H_2O} v_1 \\ \rho_{AlHO} v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p + \rho_1 v_1^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p v_1 \end{pmatrix}$$

Индексы:  
 1 – газ  
 2 – частицы алюминия  
 3 – наночастицы конденсированного оксида алюминия

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

H – водород  
 O – кислород  
 N – азот  
 $H_2O$  – пары воды  
 $AlHO$  – продукты горения Al

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

$$W = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \\ G_3 \end{pmatrix} \quad \Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \end{pmatrix}$$

# Физико-математическая модель

## Взаимодействие водорода с кислородом

одностадийная кинетика [1],  $\varphi$  – коэффициент избытка топлива.

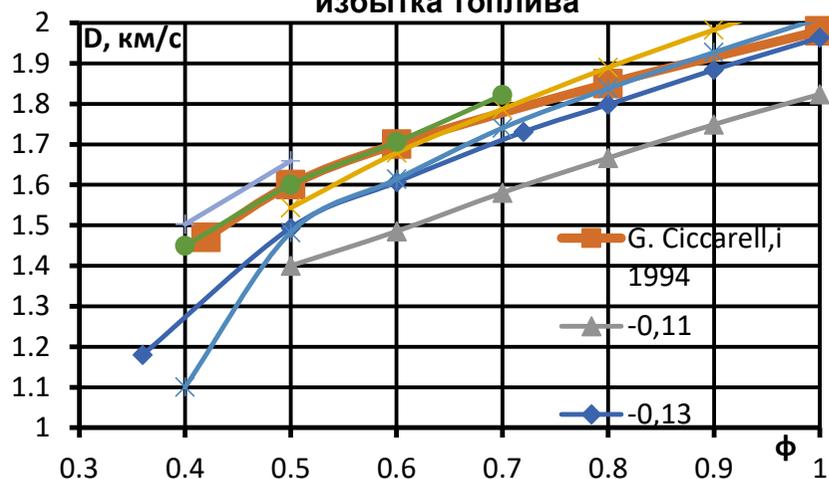
Модель расширена на нестехиометрические составы.

Интегральное тепловыделение ( $Q_H$ ) при  $0.4 \leq \varphi \leq 1$ :  $Q_H = -0.19 - 0.06 \varphi$  МДж/моль

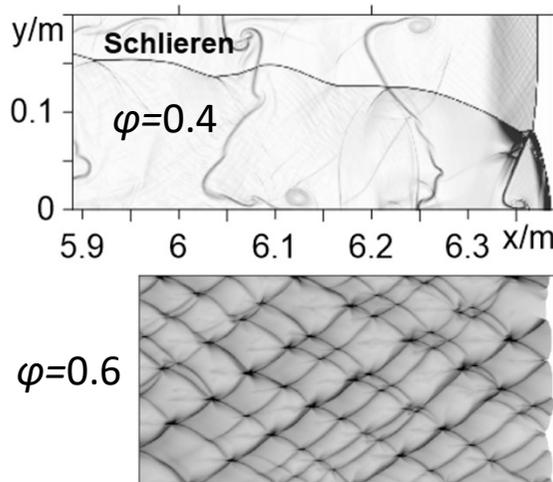
$$J_H = 0.5 \varphi \mu_H k_f \left( \frac{\rho_H}{\mu_H \cdot 10^3} \right)^m \left( \frac{\rho_O}{\mu_O \cdot 10^3} \right)^n$$

$$k_f = 4 \cdot 10^5 T_1^w \exp(-E_A / R_{un} T_1)$$

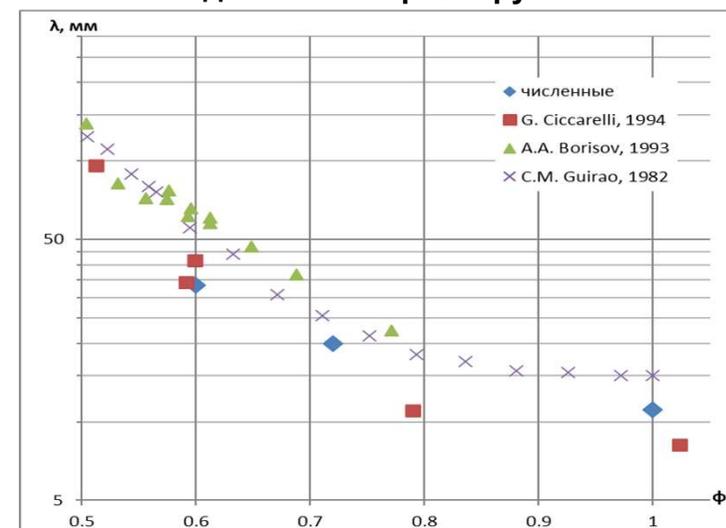
Валидация модели по зависимости скорости детонации от коэффициента избытка топлива



Ячеистая детонация в бедных газовых смесях



Сравнение с экспериментальными данными по размеру ячейки



1. Bedarev IA, Rylova K V., Fedorov A V. Application of detailed and reduced kinetic schemes for the description of detonation of diluted hydrogen–air mixtures. Combust Explos Shock Waves 2015;51:528–39.

# Физико-математическая модель

## Реакции взаимодействия алюминия с кислородом и парами воды

аррениусовского типа:

$$J_{2i} = \frac{1}{\tau_{2i}} \rho_2 (d_2 / d_0)^{-\theta} \exp(-E_a / RT_2)$$

Константы реакций

$$E_a = 32 - 64 \text{ кДж/моль}$$

$$\theta = 0.3 \text{ для } d_2 \leq 3.5 \text{ мкм}$$

$$\theta = 2 \text{ для } d_2 > 3.5 \text{ мкм}$$

Декомпозиция оксида в субокислы ( $T_{dec} = T_{2b} + \Delta T$ )

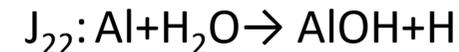
$$J_{dec} = \frac{1}{\tau_{dec}} \rho_3 (T_1 / T_{dec} - 1)$$

Основываясь на анализе равновесного состояния (по данным термодинамических расчетов [1]) принимаются во внимание реакции с образованием газообразных продуктов и реакции с образованием конденсированного оксида алюминия.

### Взаимодействие с кислородом



### Взаимодействие с парами воды



Критерий воспламенения:  $T_{2ign} = 930 \text{ К}$  температура плавления алюминиевого ядра

Условие перехода:  $T_{2b} [\text{K}] = 2960 p [\text{atm}]^{0.087}$  температура кипения алюминия

1. McBride B.J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. <https://cearun.grc.nasa.gov/>. [1994]

# Физико-математическая модель

**Взаимодействия между фазами** определяются формулами для массообмена (гетерогенные химические реакции, испарение и конденсация)

**обмена импульсом**

$$f_{ix} = \frac{\rho_i}{\tau_{iu}}(u_1 - u_i) \quad f_{iy} = \frac{\rho_i}{\tau_{iu}}(v_1 - v_i) \quad \tau_{iu} = 4d_i\rho_{ii} / 3c_{Di}\rho_{11}[(u_1 - u_i)^2 + (v_1 - v_i)^2]^{1/2}$$

$$c_D(\text{Re}_i, \text{M}_i) = \left[ 1 + \exp\left(-\frac{0.43}{\text{M}_i^{4.67}}\right) \right] \left( 0.38 + \frac{24}{\text{Re}_i} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}_i}} \right) \quad \text{Re}_i = \frac{\rho_{11}d_i|u_1 - u_i|}{\mu_1} \quad \text{M}_i = \frac{|u_1 - u_i|\sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}}$$

**межфазным теплообменом**

$$q_i = \frac{\rho_i c_{v,i}}{\tau_{iT}}(T_1 - T_i) \quad \tau_{Ti} = d_i^2 \rho_{ii} c_{vi} / 6\lambda_1 \text{Nu}_i \quad \text{Nu}_i = 2 + 0.6\text{Re}_i^{1/2} \text{Pr}^{1/3}$$

Система дополняется **уравнением идеального газа** (в приближении малых объемных концентраций частиц)

$$p = \rho_1 R T_1 \quad R = \frac{R_{\text{un}}}{\rho_1} \left( \frac{\rho_H}{\mu_H} + \frac{\rho_O}{\mu_O} + \frac{\rho_{H_2O}}{\mu_{H_2O}} + \frac{\rho_{AlHO}}{\mu_{AlHO}} + \frac{\rho_N}{\mu_N} \right)$$

**и калорическими уравнениями состояния**

$$E_1 = \frac{(u_1^2 + v_1^2)}{2} + c_{v,1}T_1 + \xi_{H_2O}Q_H - c_{p,1}T_{00} \quad E_2 = \frac{(u_2^2 + v_2^2)}{2} + c_{v,2}T_2 + Q_2 \quad E_3 = \frac{(u_3^2 + v_3^2)}{2} + c_{v,3}T_3$$

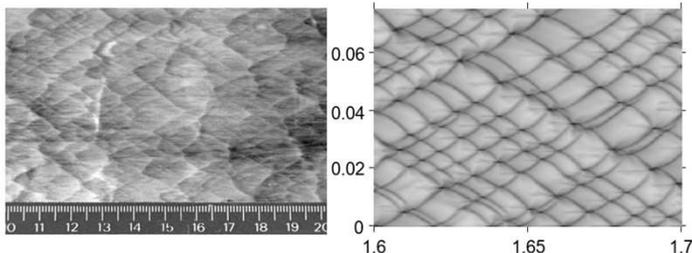
2. Bedarev IA, Rylova K V., Fedorov A V. Application of detailed and reduced kinetic schemes for the description of detonation of diluted hydrogen–air mixtures. Combust Explos Shock Waves 2015;51:528–39.

3. A.A. Afanasenkov, T.A. Khmel Validation of The Model of Hybrid Detonation of Hydrogen-Air Mixtures with Aluminum Particles // Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal. 2024. Vol. 9, iss. 2. P. 177–186.

# Валидация модели

Сравнение с экспериментальными данными ячеистой детонации в бедной водородно-воздушной смеси

Водород-воздух,  $\varphi=0.87$



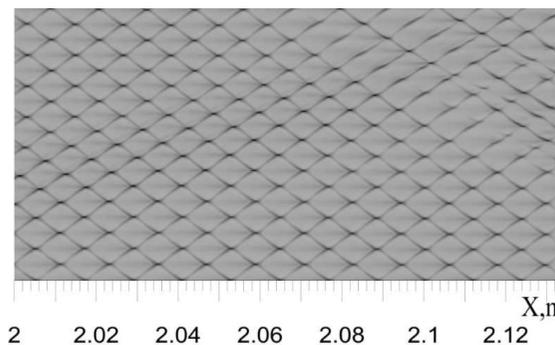
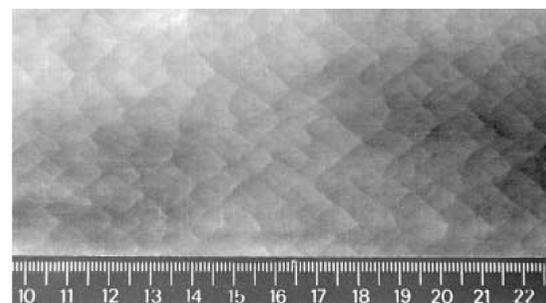
Экспериментальные В. Veysiere

Расчетные

Сравнение с экспериментальными данными ячеистой гибридной детонации

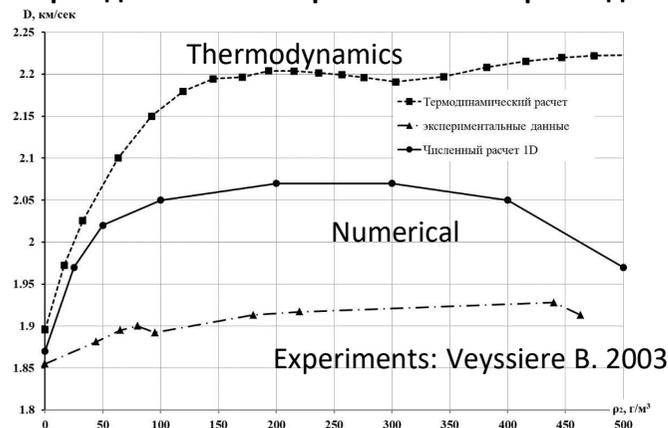
$\varphi=0.87$

Экспериментальные  
(В. Veysiere)  
хлопья  
220 г/м<sup>3</sup>



Расчетные  
сферические частицы  
1 мкм  
220 г/м<sup>3</sup>

Сравнение с экспериментальными данными и данными термодинамических расчетов по скорости детонации



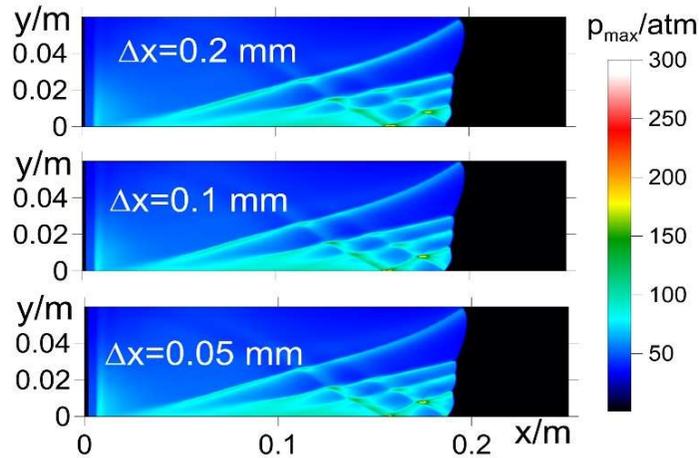
$Q_{21}=4.5$  MJ/kg  
 $Q_{22}=4$  MJ/kg  
 $Q_{23}=15$  MJ/kg  
 $Q_{dec}=9.34$  MJ/kg

# Численная технология расчетов

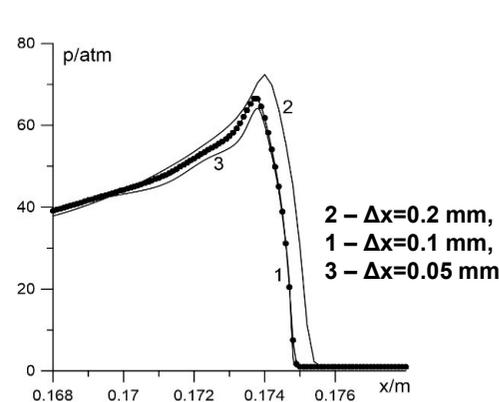
Для расчета газовой фазы использовалась TVD схема Хартена-Лакса (2 порядка),  
Для частиц – схема Джентри-Мартина-Дэйли (2 порядка)  
Технология распараллеливания на основе OpenMP

## Сходимость на вложенных сетках

Гетерогенная детонация, плоский канал с поперечным градиентом концентрации,  $d=0.6$  мкм.

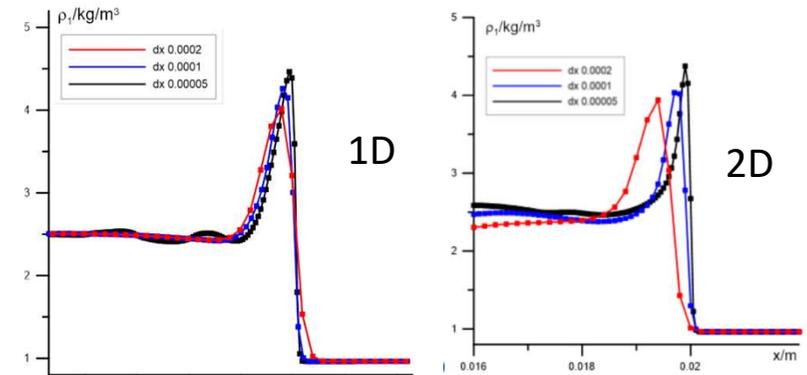
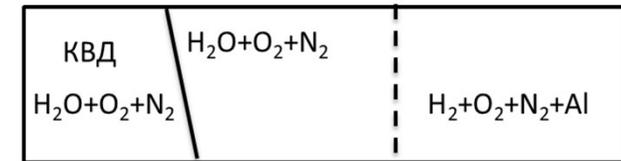


Поля максимального давления



Профили давления на нижней стенке

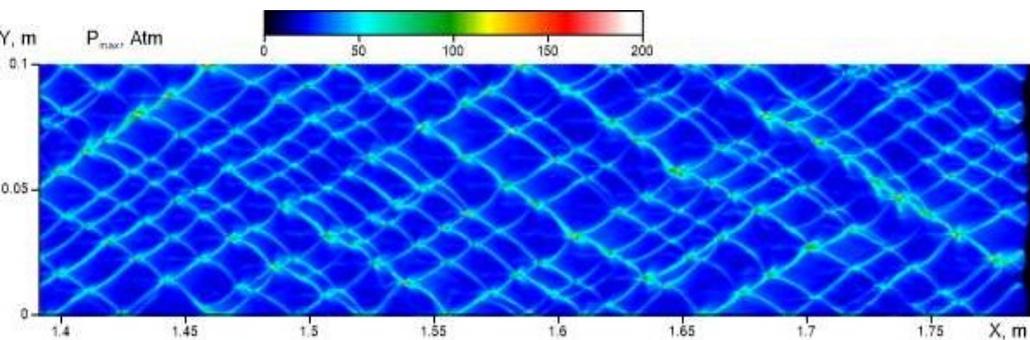
Гибридная детонация, плоский канал



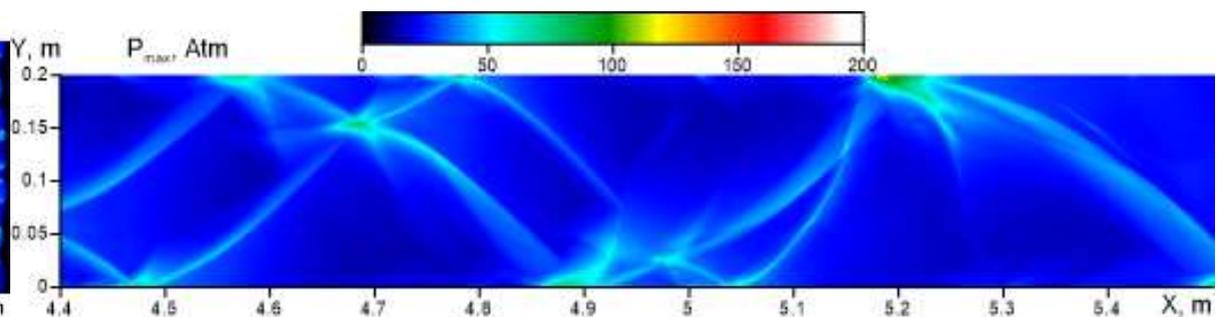
Профили плотности газа на нижней стенке

# Ячеистая детонация в газовых и гибридных смесях

Смесь  $1.2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.82\text{N}_2$   
 $\varphi = 0.6$   $\rho_{20} = 0 \text{ г/м}^3$

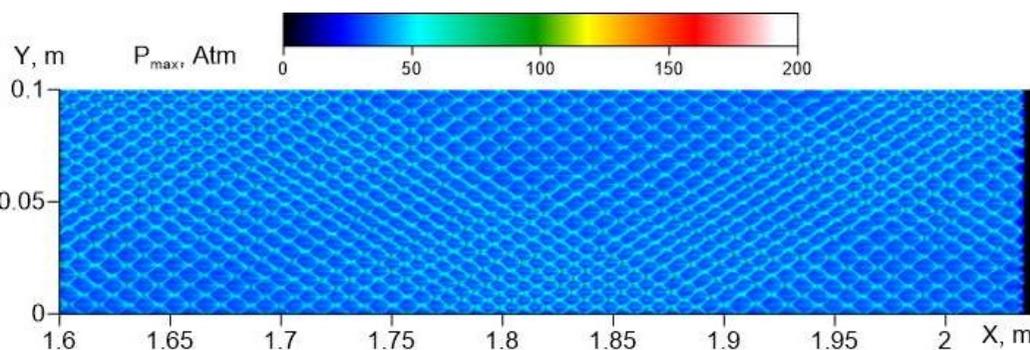


Смесь  $0.8\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.82\text{N}_2$   
 $\varphi = 0.4$   $\rho_{20} = 0 \text{ г/м}^3$

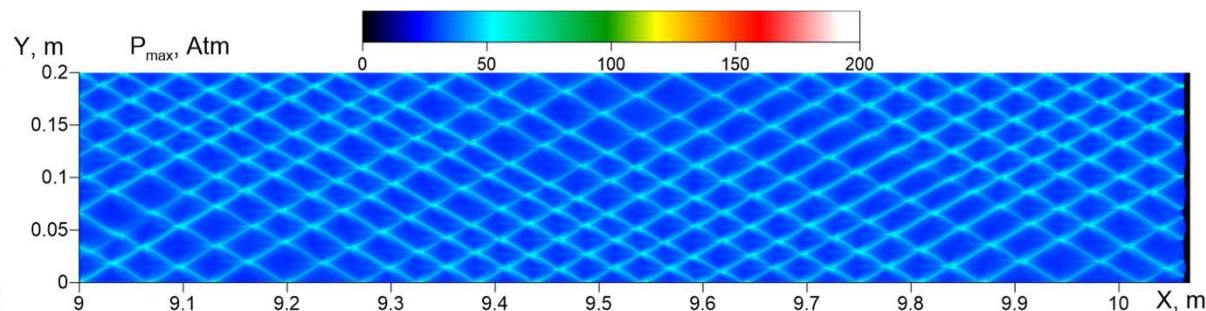


Смесь  $1.2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.82\text{N}_2 + \text{Al}$   
 $\varphi = 0.6$   $\rho_{20} = 100 \text{ г/м}^3$

$d = 1 \text{ мкм}$



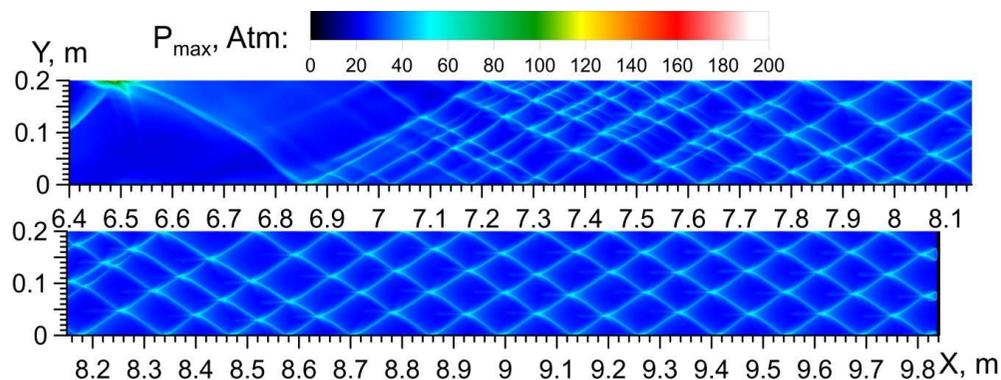
Смесь  $0.8\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.82\text{N}_2 + \text{Al}$   
 $\varphi = 0.4$   $\rho_{20} = 100 \text{ г/м}^3$



Добавка частиц приводит к увеличению скорости детонации, регуляризации, уменьшению размера ячейки

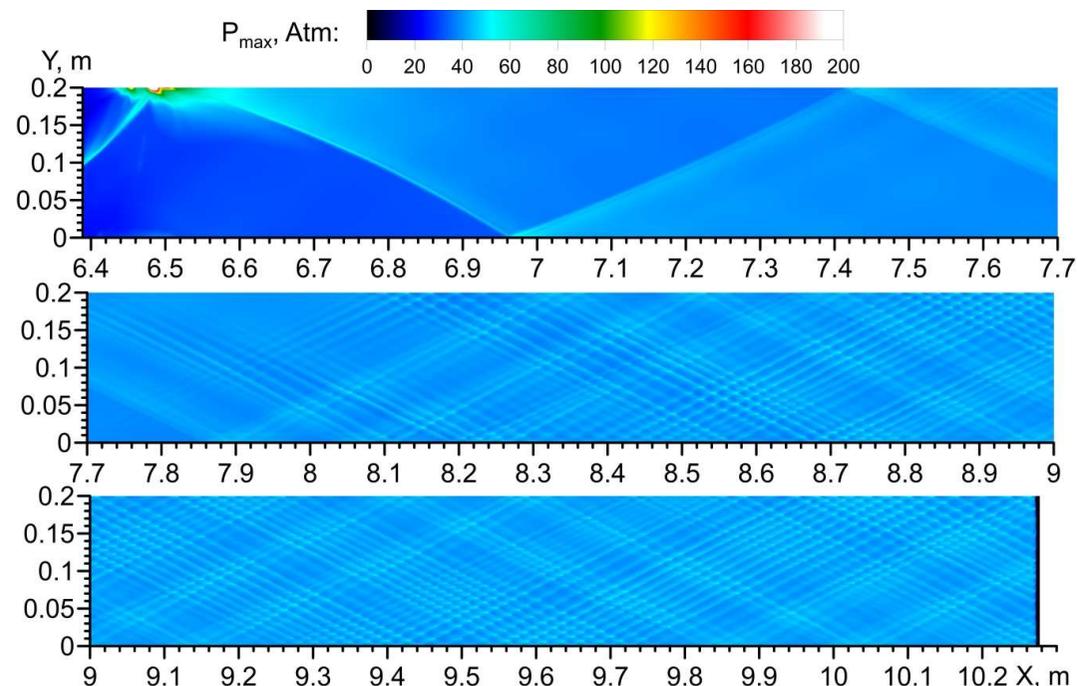
# Гибридная детонация в смесях различной загрузки

$\rho_{20}=50 \text{ г/м}^3$   $D=1.74 \text{ км/сек}$   $\lambda=8 \text{ см}$

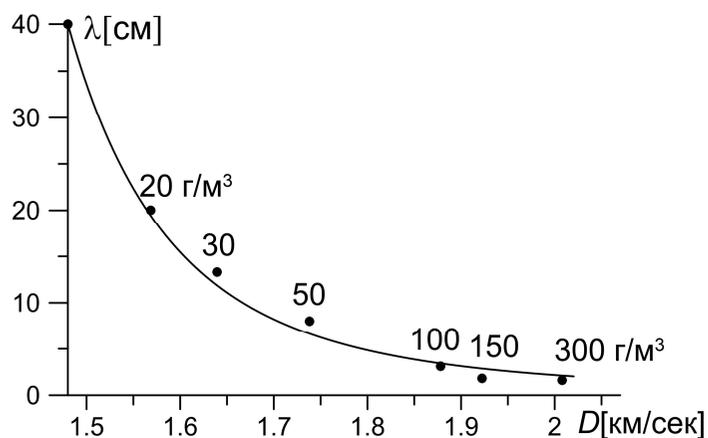


$\varphi=0.4$   $d=1 \text{ мкм}$

$\rho_{20}=300 \text{ г/м}^3$



$D=2.01 \text{ км/сек}$   $\lambda=1.6 \text{ см}$

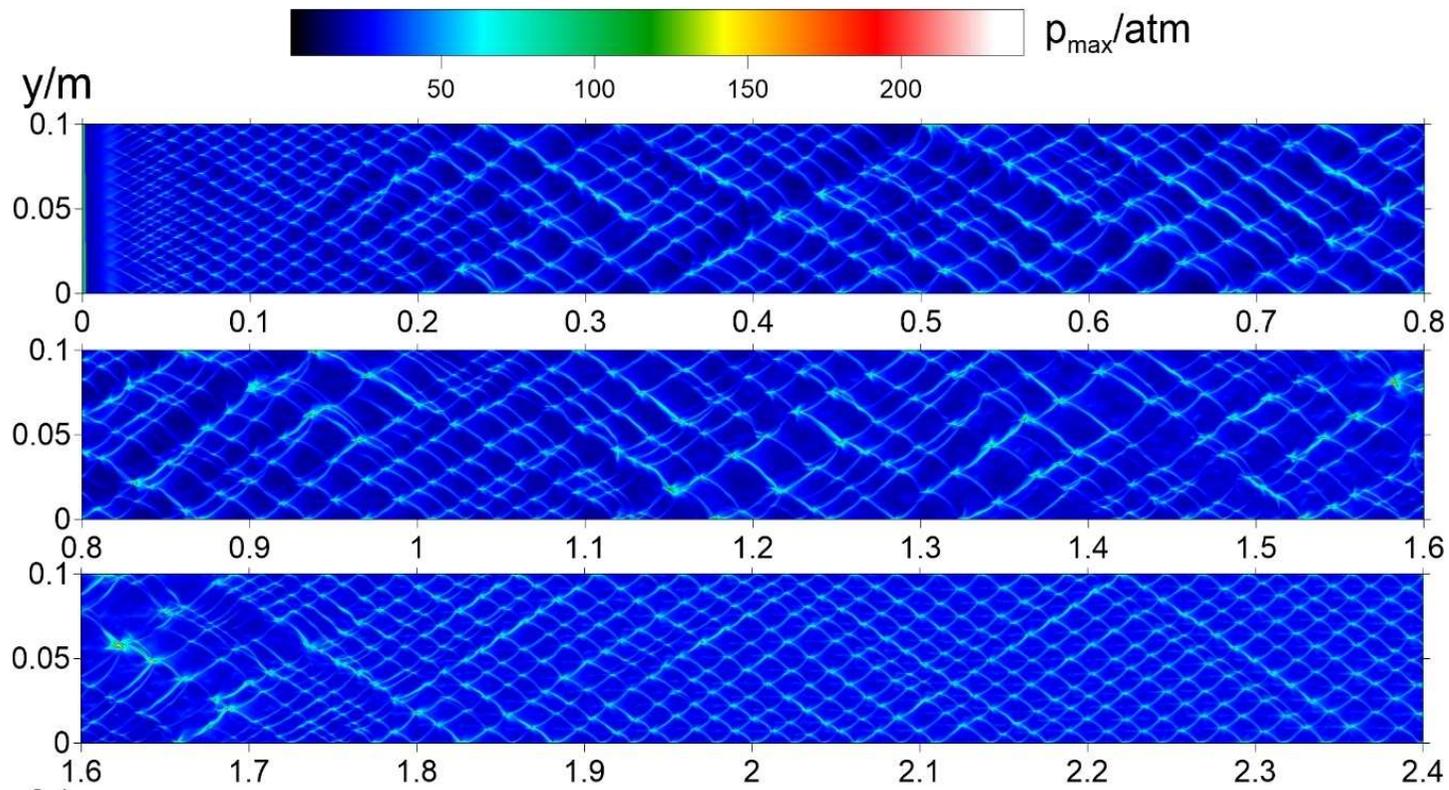


$$\lambda = \lambda_0 \delta \exp[E / RT_{ZND} (\delta^{-2} - 1)], \quad \delta = D/D_0,$$

**Связь между скоростью детонации и размером ячейки отвечает известной зависимости**

# Гибридная детонация: влияние размера частиц

Гибридная смесь ( $\varphi=0.6$ )  $1.2\text{H}_2+\text{O}_2+3.82\text{N}_2+\text{Al}$ ,  $d=3.5$  мкм

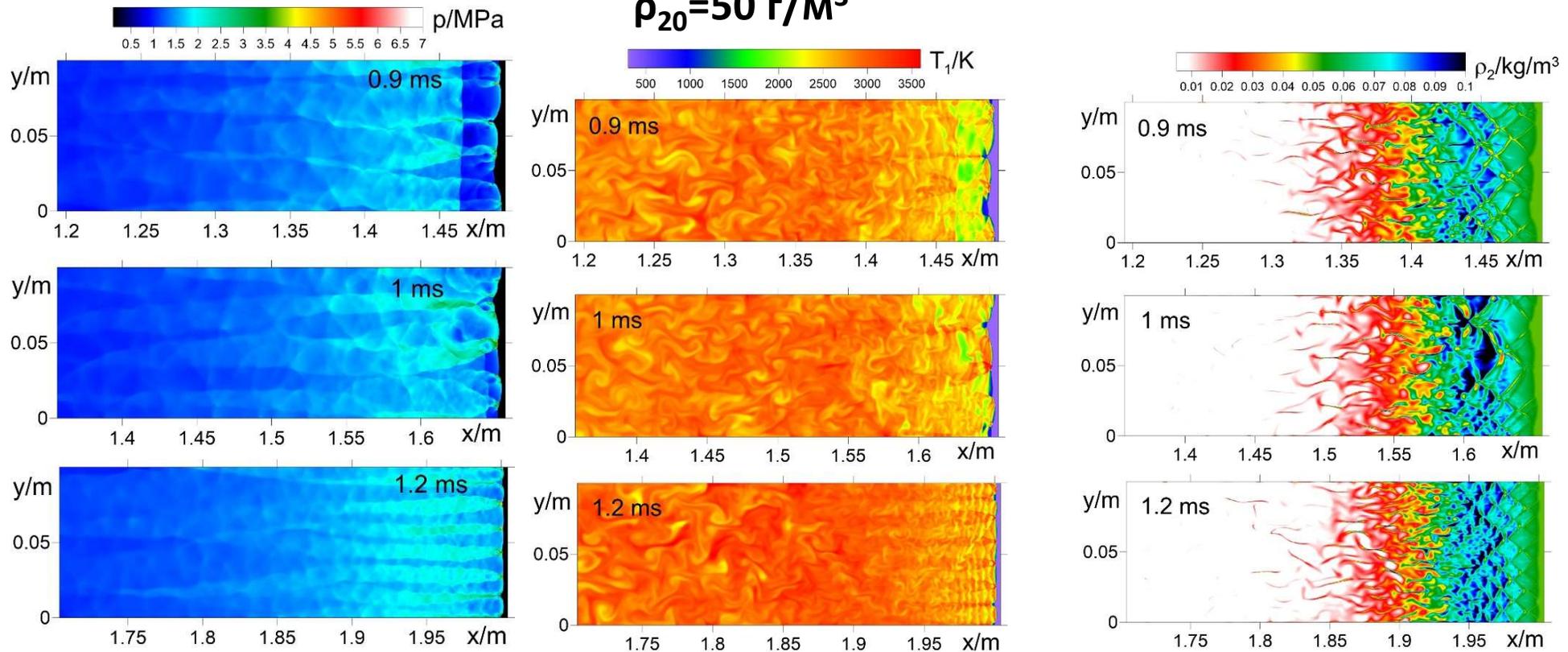


$\rho_{20}=50$  г/м<sup>3</sup>  
 $D=1.85$  км/сек  
 $\lambda\approx 1.5$  см

С увеличением размера частиц увеличивается путь формирования регулярной ячеистой структуры.  
Скорость фронта установившегося режима слабо зависит от размера частиц.

# Гибридная детонация: двух-фронтные структуры

Гибридная смесь ( $\varphi=0.6$ )  $1.2\text{H}_2+\text{O}_2+3.82\text{N}_2+\text{Al}$ ,  $d=3.5$  мкм  
 $\rho_{20}=50$  г/м<sup>3</sup>



В смесях с частицами 3.5 мкм и более крупных формируются временно существующие двух-фронтные конфигурации, по мере распространения фронты сливаются, структура переходит к мелкоячеистой.

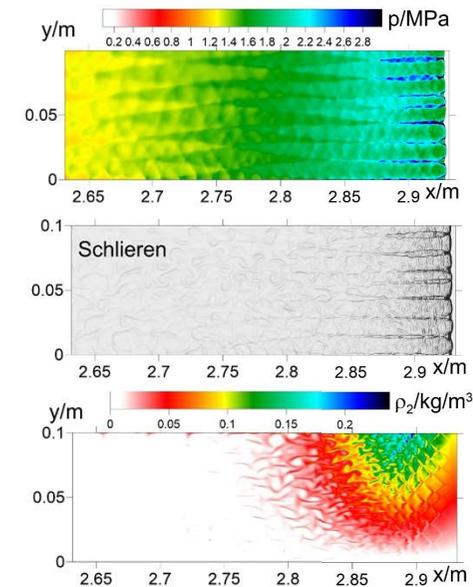
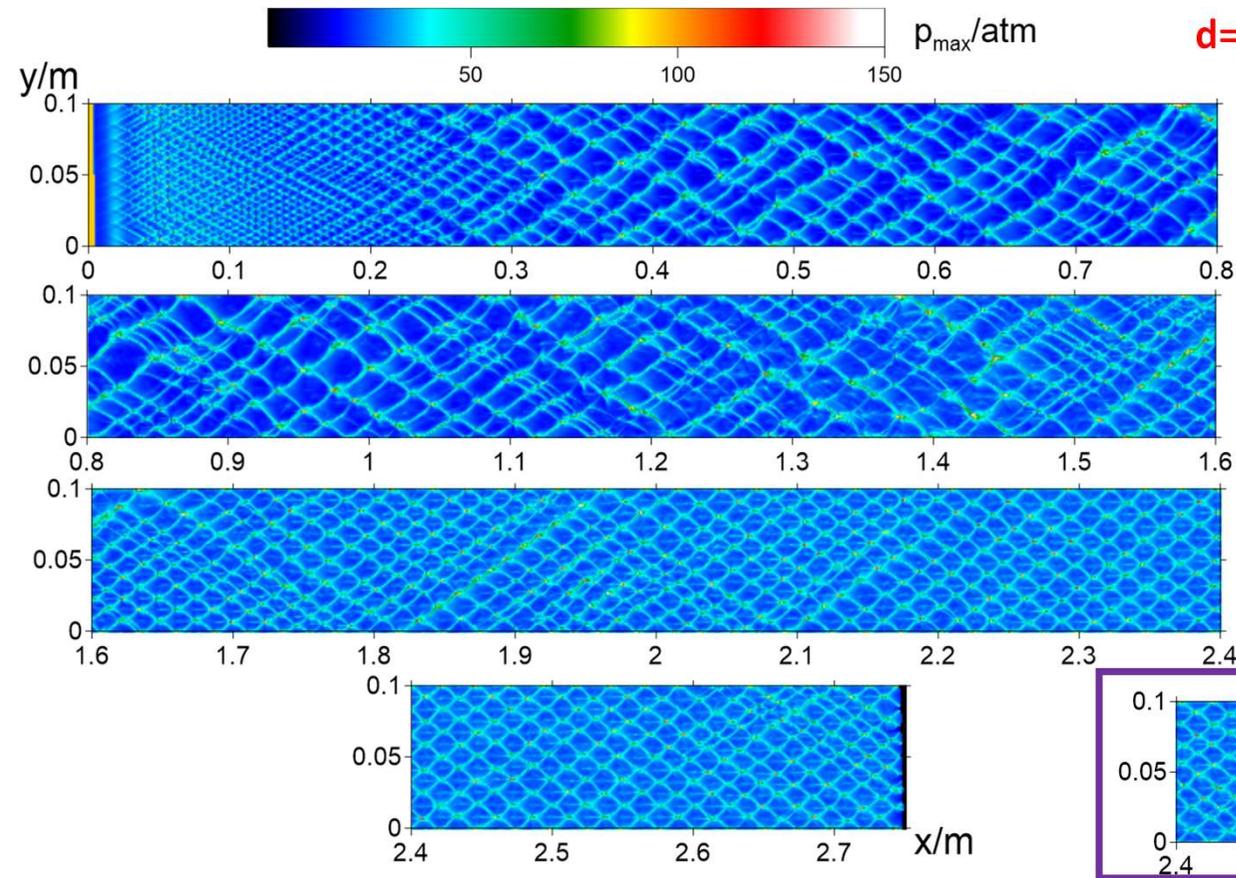
# Детонация в канале с поперечным градиентом плотности частиц

Гибридная смесь ( $\varphi=0.6$ )  $1.2\text{H}_2+\text{O}_2+3.82\text{N}_2+\text{Al}$   $p_0=1$  атм

$d=3.5$  мкм

$\rho_{20}=0$  (низ)

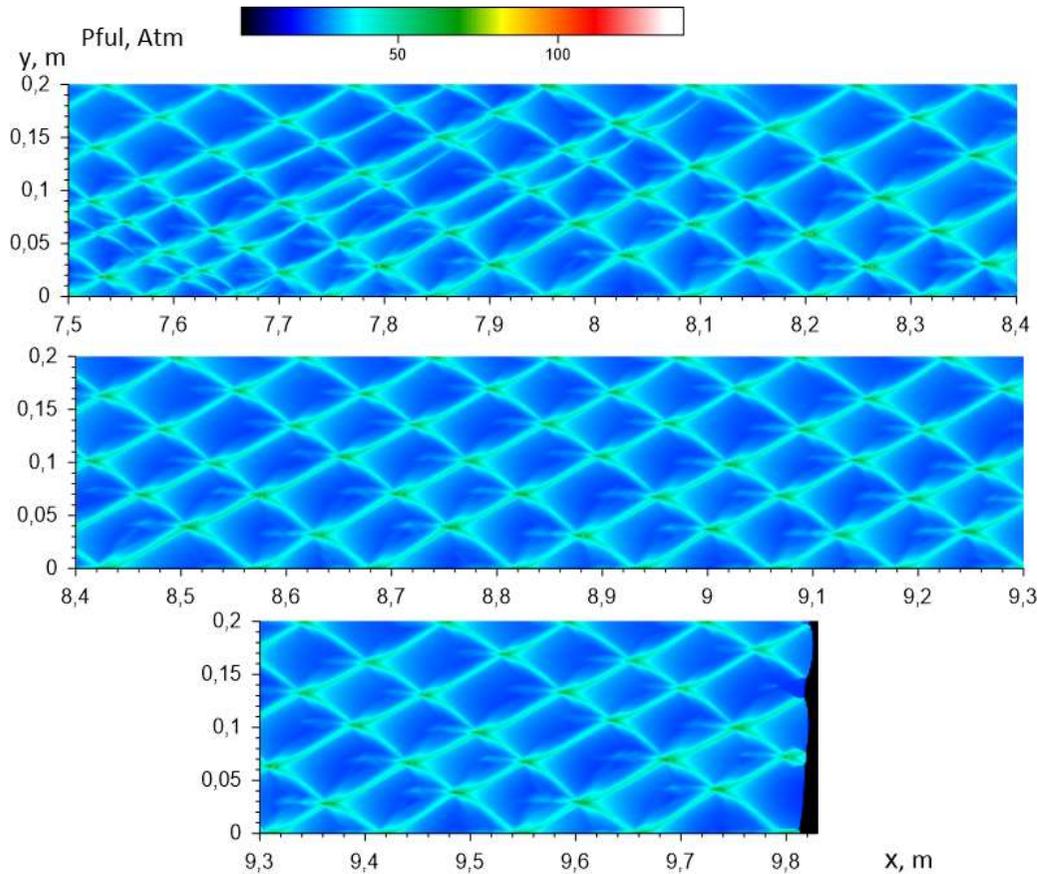
$\rho_{20}=100$  г/м<sup>3</sup> (верх)



$\rho_{20}=50$  г/м<sup>3</sup>  
(однородная)

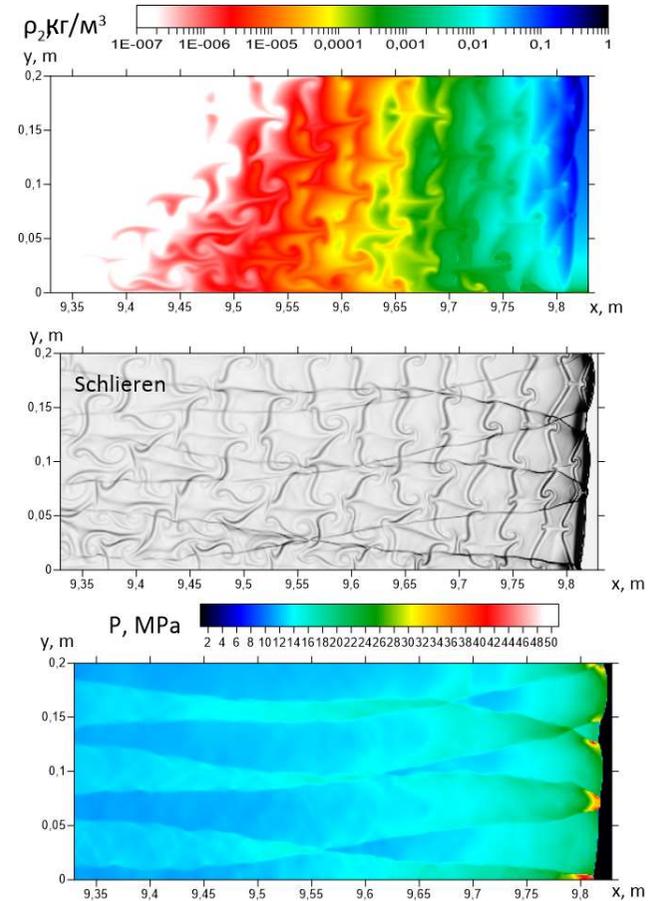
При градиентном распределении частиц ( $\varphi=0.6$ ) картина идентична однородной смеси средней загрузки.

# Детонация в канале с поперечным градиентом плотности частиц



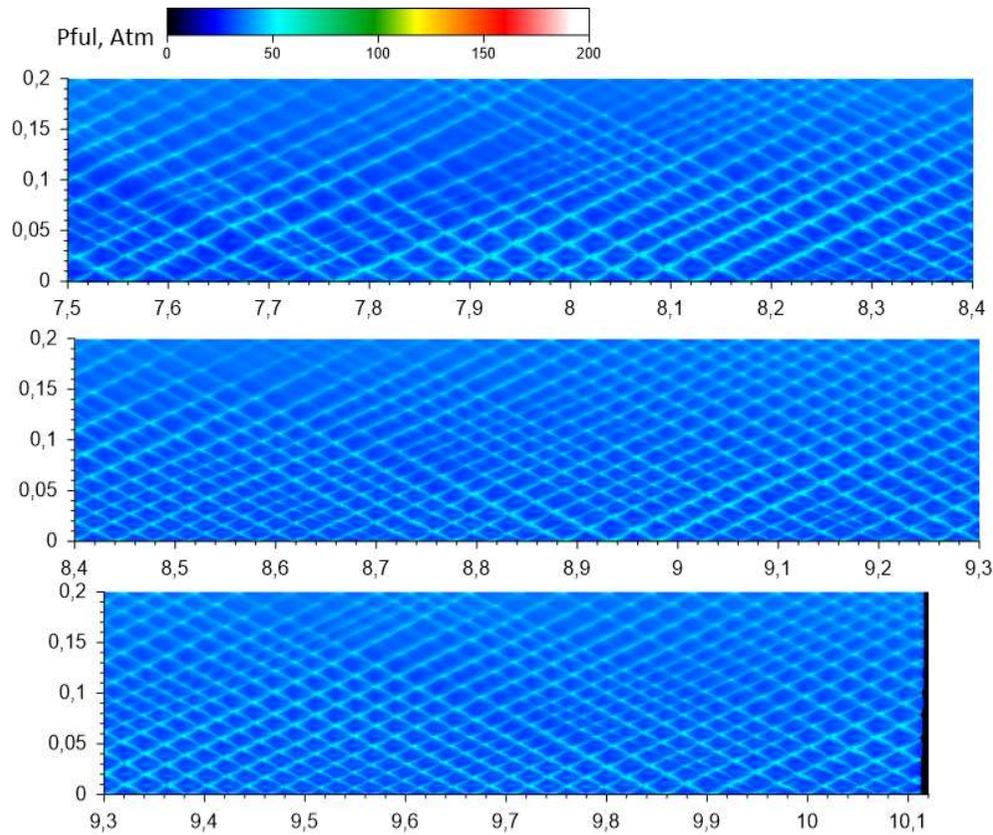
$\varphi=0.4$   
 $\rho_{20\_bot}=0 \text{ г/м}^3$   
 $\rho_{20\_top}=100 \text{ г/м}^3$   
 $d=1 \text{ мкм}$

$D=1.72 \text{ км/сек}$   
 $\lambda=6.67 \text{ см}$



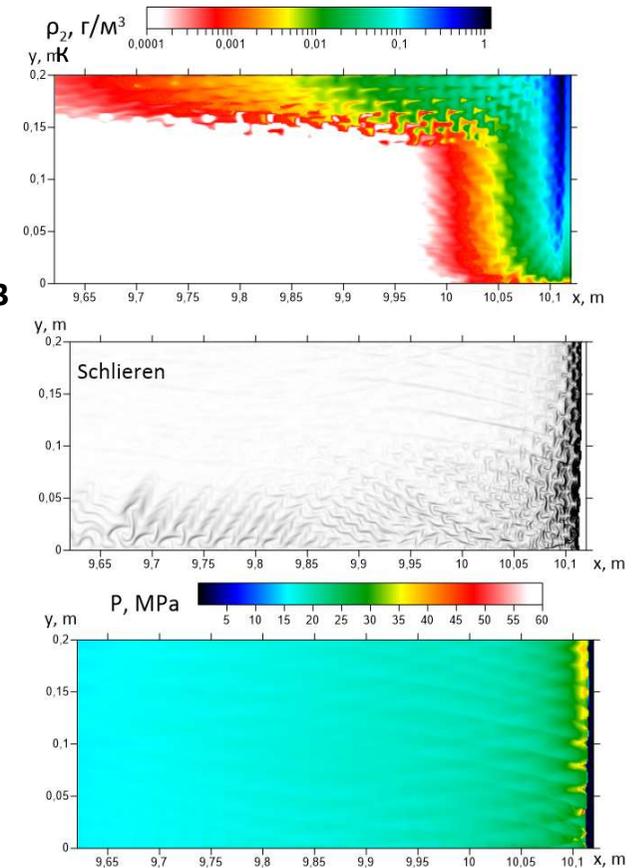
При градиентном распределении частиц ( $\varphi=0.4$ ) фронт детонации наклонный, ячейки косоугольные.

# Детонация в канале с поперечным градиентом плотности частиц



$\varphi=0.4$   
 $\rho_{20\_bot}=0 \text{ г/м}^3$   
 $\rho_{20\_top}=300 \text{ г/м}^3$   
 $d=1 \text{ мкм}$

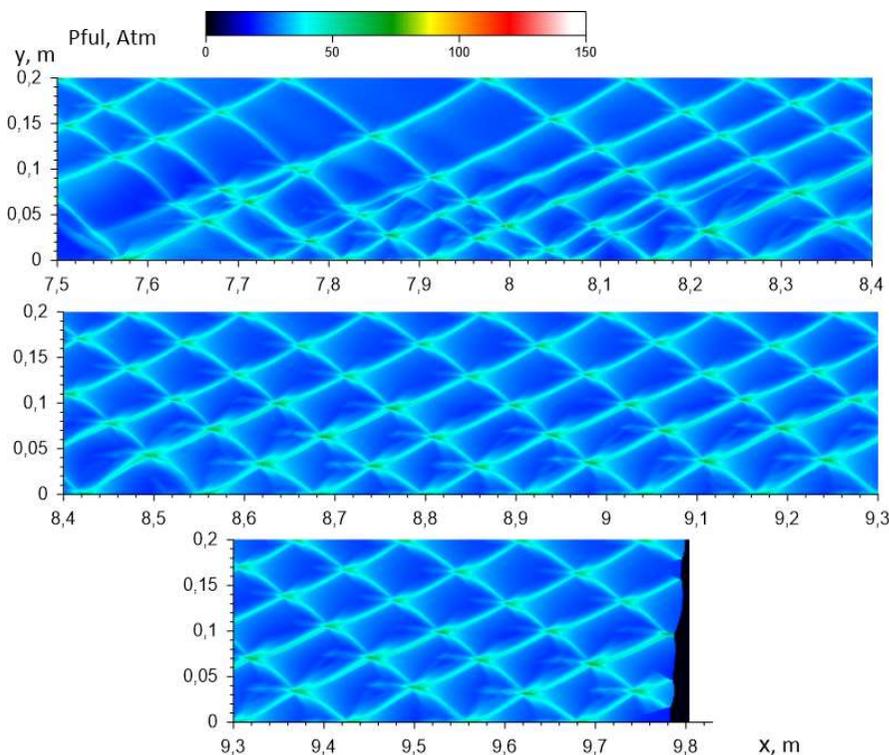
$D = 1.91 \text{ км/сек}$   
 $\lambda = 1.9 \text{ см}$



В области высокой загрузки частиц (около  $300 \text{ г/м}^3$ ) «размытые» траектории тройных точек: влияние релаксационных процессов межфазного взаимодействия.

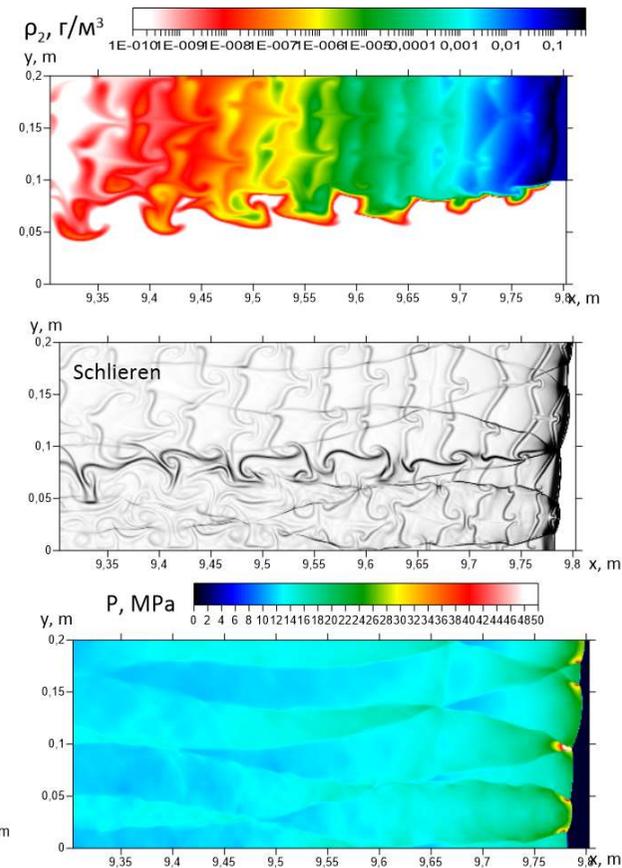
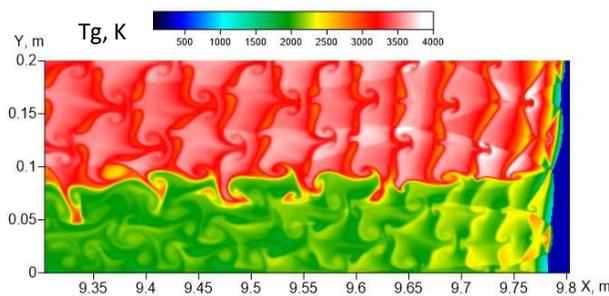
# Детонация в канале со слоевым распределением частиц

Гибридная смесь ( $\varphi=0.4$ )  $0.8\text{H}_2+\text{O}_2+3.82\text{N}_2+\text{Al}$   $p_0=1$  атм



$D = 1.72$  км/сек  $\lambda = 6.67$  см

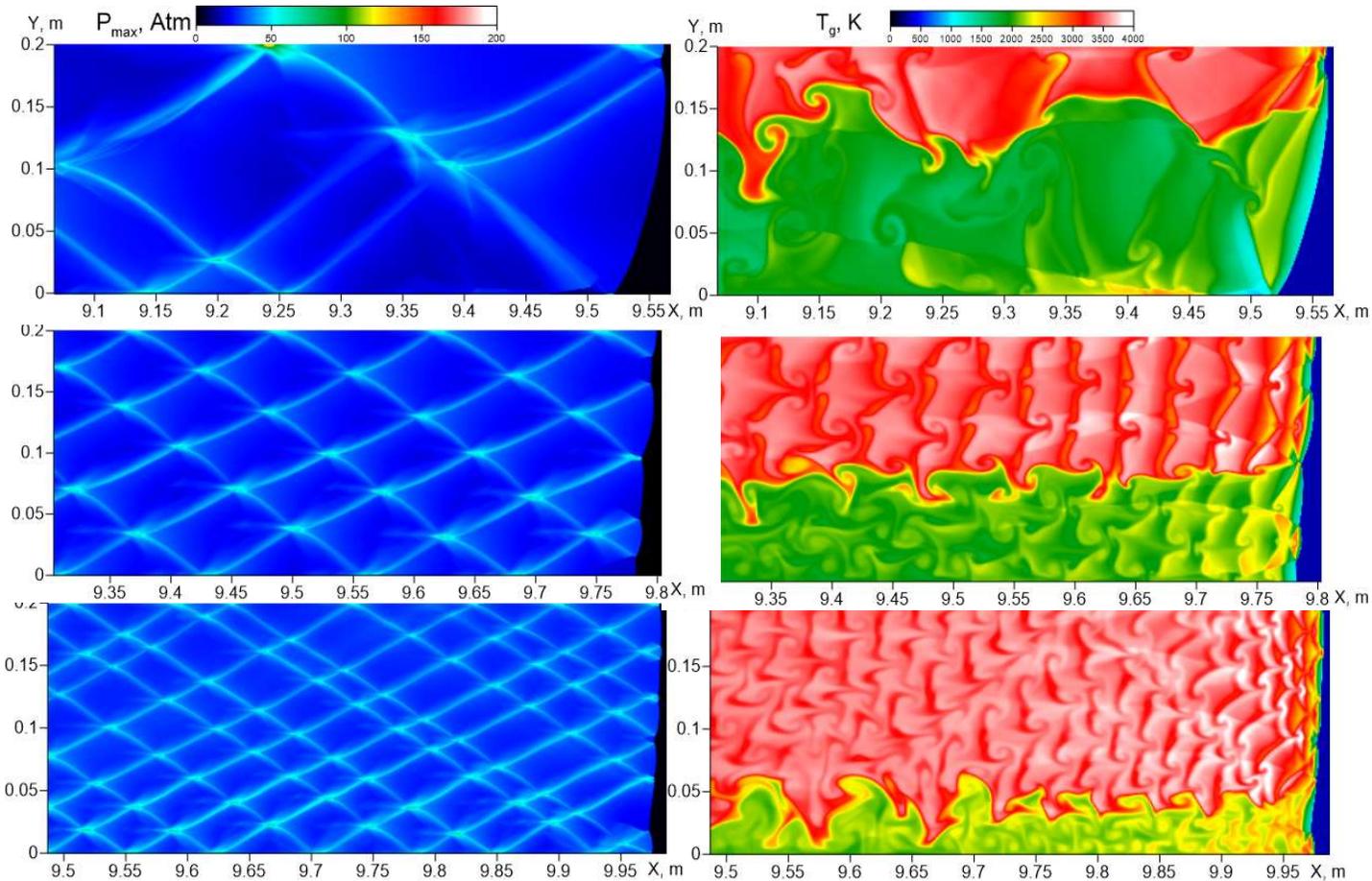
$d=1$  мкм  
 $\rho_{20}=0$  (низ)  
 $\rho_{20}=100$  г/м<sup>3</sup> (верх)  
 $h/H=0.5$



При слоевом распределении частиц в канале картины тройных точек аналогичны градиентному распределению. На мгновенных картинах видно развитие неустойчивости на границе слоя.

# Детонация в канале со слоевым распределением частиц

Влияние толщины слоя ( $\phi=0.4$ ), загрузка частиц  $100 \text{ г/м}^3$



$h/H=0.25$

$D = 1.56 \text{ км/сек}$

$\lambda = 15 \text{ см}$

$h/H=0.5$

$D = 1.72 \text{ км/сек}$

$\lambda = 6.67 \text{ см}$

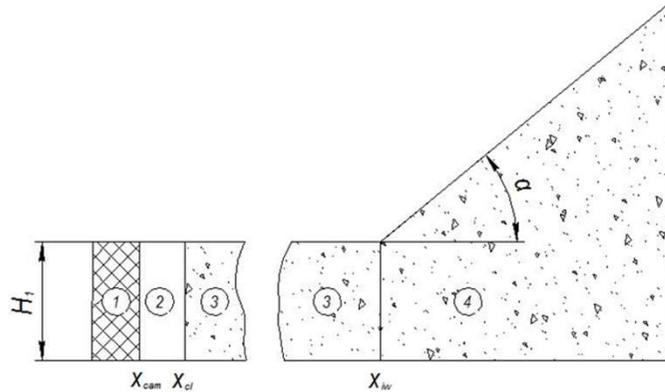
$h/H=0.75$

$D = 1.77 \text{ км/сек}$

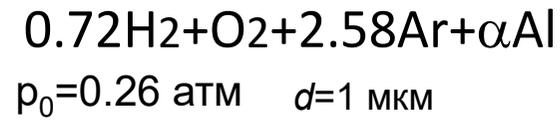
$\lambda = 4.4 \text{ см}$

С увеличением толщины слоя частиц происходит рост скорости детонации и уменьшение размера ячейки

# Распространение детонации в расширяющейся области

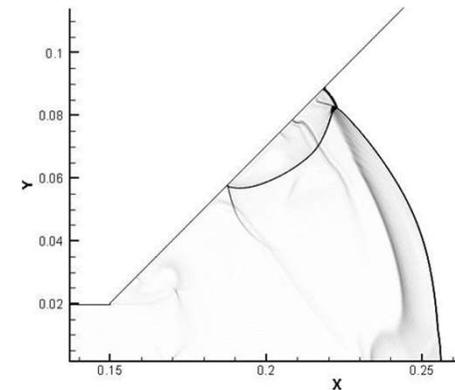
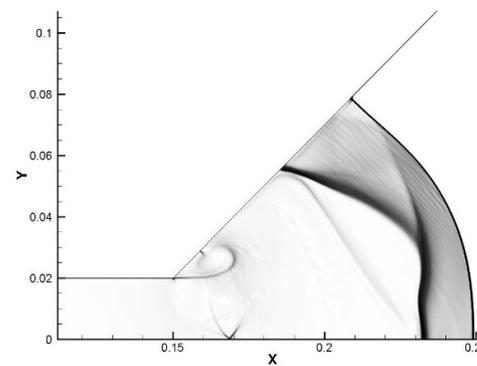
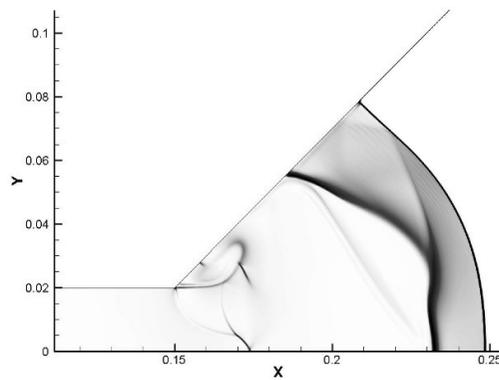


Газ



$\rho_{20} = 1 \text{ г/м}^3$

$\rho_{20} = 3 \text{ г/м}^3$



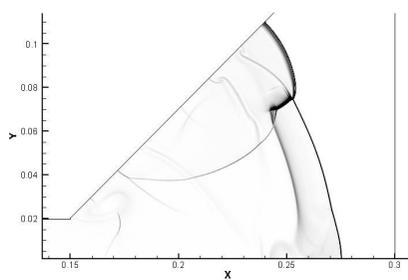
Численные Шлирен-фотографии на один и тот же момент времени (18 мс)

**Добавка малого количества частиц предотвращает срыв детонации**

# Распространение детонации в расширяющейся области

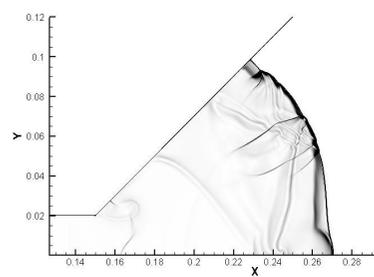
$0.72\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2.58\text{Ar} + \alpha\text{Al}$      $p_0 = 0.26 \text{ атм}$      $d = 1 \text{ мкм}$

$\rho_{20} = 3 \text{ г/м}^3$     0.22 мс



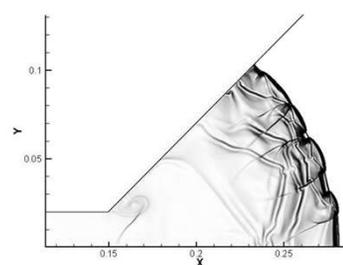
Численный Шлирен

$\rho_{20} = 10 \text{ г/м}^3$     0.18 мс

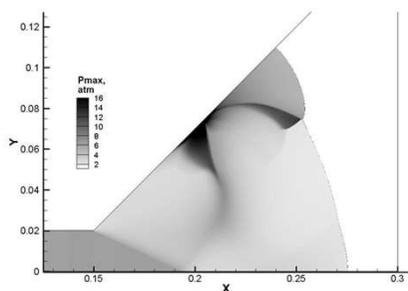


Численный Шлирен

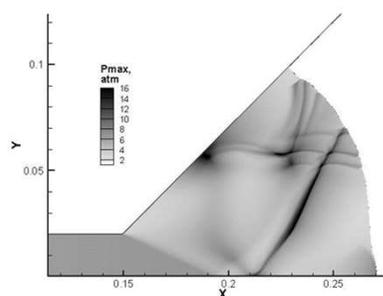
$\rho_{20} = 20 \text{ г/м}^3$     0.18 мс



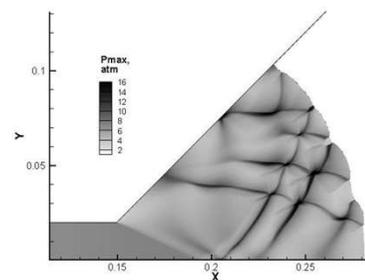
Численный Шлирен



Поле истории  
максимального давления



Поле истории  
максимального давления



Поле истории  
максимального давления

При увеличении концентрации частиц формируются ячеистые структуры

## Заключение

- Разработана физико-математическая модель и численная технология расчетов течений гибридной детонации в смесях мелкодисперсных частиц алюминия с окислителем или горючими газами (водород-кислород-аргон, водород-воздух).
- Модели обеспечивают согласование с известными экспериментальными данными и данными термодинамических расчетов по скорости детонации, характеру и размерам детонационных ячеек.
- Получен ряд новых научных результатов о характеристиках гибридной детонации в неоднородных газовзвесах (с продольными или поперечными градиентами концентраций, слоевыми распределениями), о влиянии частиц на условия перехода детонации в расширяющуюся область.
- Полученные данные позволяют рассматривать добавки частиц алюминия с различным распределением в пространстве для управления процессами детонации в водородно-воздушных смесях.

Исследования выполнялись при поддержке РФФ,  
проект 24-29-00336.

Спасибо за внимание!