

01.1;03.1;03.4

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

© Т.А. Хмель, С.А. Лаврук

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Новосибирск, Россия
E-mail: khmel@itam.nsc.ruПоступило в Редакцию 8 декабря 2023 г.
В окончательной редакции 9 января 2024 г.
Принято к публикации 9 января 2024 г.

Представлены результаты двумерного численного моделирования детонации бедных водородно-воздушных смесей с добавками частиц алюминия диаметром 150–300 нм. Установлено влияние частиц на характер ячеистой детонации (ячейки становятся регулярными) и размер ячейки (значительно уменьшается с увеличением загрузки). Определено влияние частиц на скорость детонации: в интервале коэффициента избытка топлива 0.6–1 прирост скорости может составлять до 15%.

Ключевые слова: детонация, численные методы, водородно-воздушная смесь, гибридная детонация.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.08.57519.19832

Исследование процессов детонации мелкодисперсной пыли металлов и неметаллов в первую очередь связано с процессами взрыво- и пожаробезопасности. Взрывы пылевых облаков могут приводить к тяжелым повреждениям зданий и сооружений, а также к человеческим жертвам [1]. С другой стороны, мелкодисперсные порошки металлов и неметаллов могут быть использованы в качестве добавок в топливо для управления процессами горения и улучшения импульсных и энергетических характеристик.

В экспериментах [2] отмечено увеличение скорости детонации при наличии частиц алюминия в смесях реагирующих газов, также наблюдались двойные скачки давления. Исследования гибридной детонации проводились ранее теоретически [3,4] и экспериментально [5]. В [3,4] были построены модели, описывающие двухфронтные структуры течения, в [5] исследовано влияние реагирующих частиц на структуру течений детонации, в том числе ячеистой. В [6,7] в рамках физико-математической модели механики сплошных сред с привлечением уравнений приведенной кинетики исследовались процессы гибридной детонации в водородно-кислородных смесях, разбавленных аргоном. Все предшествующие теоретические исследования гибридной детонации ограничивались частицами микронных размеров. Субмикронные и нанодисперсные взвеси представляют интерес в связи с переходом режима горения частиц алюминия при уменьшении их диаметра от диффузионно-лимитированного к кинетическому [8]. В гетерогенной детонации это проявлялось в увеличении степени нерегулярности и размера детонационной ячейки при размерах частиц порядка 100 нм [9]. В настоящей работе рассматриваются бедные водородно-воздушные смеси с добавками частиц алюминия диаметром 150–300 нм. Целью исследования является анализ влияния частиц на скорость и структуру

детонационной волны для смесей с различным соотношением окислителя и горючего.

Рассматривается плоский канал, заполненный предварительно перемешанной смесью водорода, воздуха и диспергированных частиц алюминия. Для инициирования детонации использовалась камера высокого давления, заполненная продуктами сгорания (парами воды и воздухом). Быстрое развитие поперечных волн обеспечивается небольшим наклоном разделяющей диафрагмы. Параметры камеры выбираются так, чтобы после разрыва диафрагмы в газе формировалась слабопересжатая детонация, которая переходит в самоподдерживающийся режим с формированием ячеистых структур. Рассматривались горючие газовые смеси с коэффициентом избытка топлива (по водороду) $\varphi = 0.6–0.9$, плотность пыли частиц алюминия ρ_{20} варьировалась от 10 до 150 г/м³.

Физико-математическая модель и ее параметры, численная технология и тестирование модели описаны в [6,7]. Используется модель горения алюминия [9,10] с уравнением приведенной кинетики аррениусовского типа. Применительно к гибридной детонации предполагается, что при горении частицы образуются либо конденсированные наночастицы оксида алюминия при температуре ниже 3500 К, либо газообразные продукты при температуре выше 3500 К. Горение водородно-воздушной смеси описывалось в рамках модели приведенной кинетики [11], апробированной в задачах подавления детонации в [12,13]. Для стехиометрических водородно-воздушных смесей в [13] принималось $Q_{\text{Hox}} = -0.13$ МД/мол — энергосодержание при горении газовой смеси. Поправки для бедных по водороду составов определены нами как $Q_{\text{Hox}} = -0.19 + 0.06\varphi$ МД/мол, что обеспечивает соответствие экспериментальной зависимости скорости детонации от коэффициента избытка топлива [14] в интервале $0.4 \leq \varphi \leq 1$. Тепловые эффекты сгорания алюминия приняты следующими: при образовании частиц

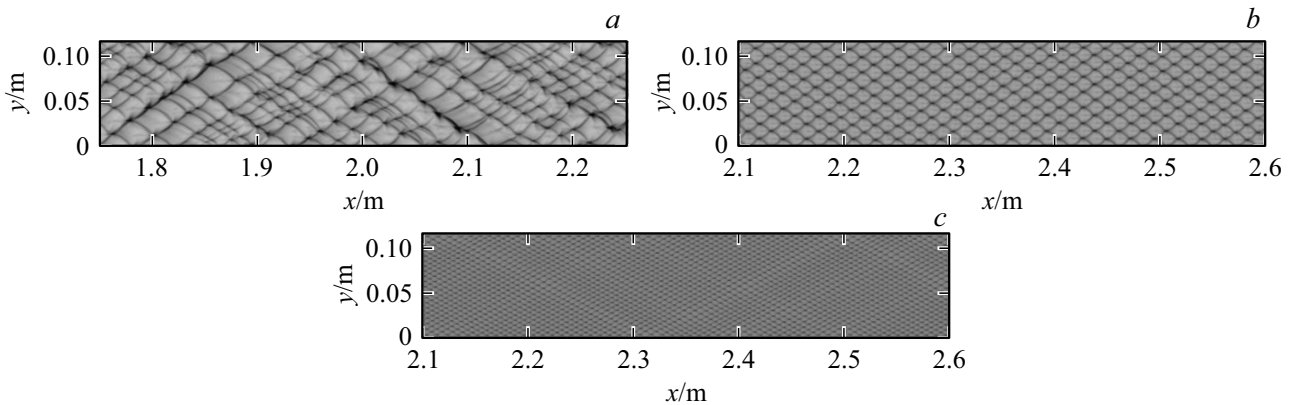


Рис. 1. Картины тройных точек газовой детонации (а), гибридной детонации ($d = 300$ nm) для $\rho_{20} = 20$ (b) и 100 g/m^3 (c).

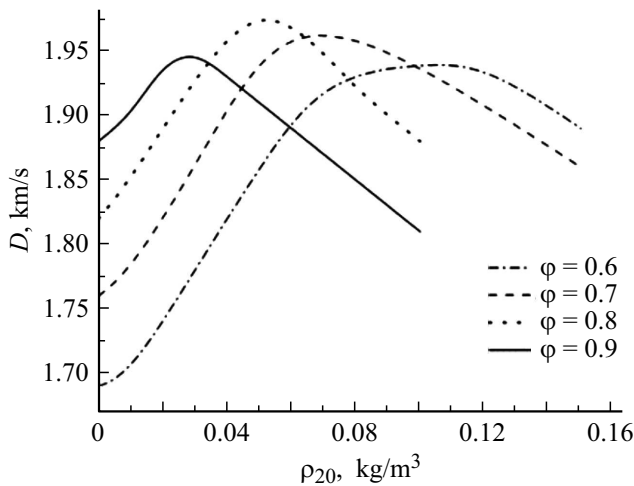


Рис. 2. Зависимость скорости лидирующего фронта от плотности пыли алюминиевых частиц диаметром $d_{20} = 300$ nm.

оксида алюминия $Q_{\text{Al}} = 15 \text{ MJ/kg}$, при образовании газобразных субокислов $Q_{2\text{AlOx}} = 4.5 \text{ MJ/kg}$ (соответственно $Q_{\text{AlOx}} = \mu_{\text{Al}}(Q_{\text{Al}} - Q_{2\text{AlOx}})/\mu_{\text{AlOx}} = 9.34 \text{ MJ/kg}$, где μ_{Al} , μ_{AlOx} — молекулярный вес алюминия и его субокислов).

Результаты расчетов для горючей смеси с $\phi = 0.7$ при различных значениях плотности пыли частиц ρ_{20} представлены на рис. 1. Как видно, чистая газовая детонация (рис. 1, а) характеризуется умеренно нерегулярной ячеистой структурой, где средний размер ячейки составляет 1–2 см (пять-шесть ячеек на ширину канала). При добавлении даже небольшой плотности пыли $\rho_{20} = 20 \text{ g/m}^3$ (рис. 1, b) происходит регуляризация ячеистой структуры с семью равномерными ячейками на ширину канала. Увеличение ρ_{20} до 100 g/m^3 приводит к увеличению числа регулярных ячеек до 19 (рис. 1, c). Отметим, что при этом уменьшается давление в тройных точках (до $\sim 100 \text{ atm}$), что существенно меньше, чем при газовой детонации (где оно может достигать 200 atm) (рис. 1, а). Также отметим, что в нанодисперсных гибридных смесях формирования двухфронтных

структур, наблюдаемых в расчетах с частицами диаметром более $3.5 \mu\text{m}$, не происходит. Это можно связать с резким уменьшением времен скоростной и тепловой релаксации по сравнению с таковыми для аналогичных процессов в газозвесах частиц микронных размеров, вследствие чего воспламенение частиц происходит уже в зоне горения газовой смеси, состояние которой не достигло равновесия Чепмена–Жуге. Тем не менее при этом субмикронные частицы обеспечивают стабилизацию ячеистой структуры и ускорение распространения лидирующего детонационного фронта.

Влияние добавки частиц на скорость детонации представлено на рис. 2, где приведены зависимости скорости лидирующего фронта от ρ_{20} для частиц диаметром 300 nm при различных значениях коэффициента избытка топлива ϕ . Все зависимости имеют ярко выраженный максимум, т. е. для каждого ϕ существует оптимальная концентрация частиц. Дальнейшее увеличение концентрации частиц снижает скорость детонации, что связано с дефицитом кислорода для обеспечения горения алюминия (взаимодействие алюминия с парами воды в модели не рассматривается). Также оптимальная концентрация снижается с приближением к стехиометрии: если для $\phi = 0.6$ максимум скорости наблюдался при $\rho_{20} = 100\text{--}120 \text{ g/m}^3$, то при $\phi = 0.9$ максимум был достигнут при $\rho_{20} = 30 \text{ g/m}^3$. Максимальная скорость детонации достигается при $\phi = 0.8$ и $\rho_{20} = 50 \text{ g/m}^3$, т. е. существует также оптимальное значение коэффициента избытка топлива ϕ . Таким образом, в гибридной детонации коэффициент избытка топлива и плотность пыли частиц являются управляющими параметрами.

Влияние размера частиц на картины установившейся ячеистой гибридной детонации представлено на рис. 3 для $\rho_{20} = 50 \text{ g/m}^3$. Здесь видно, что уменьшение вдвое размера частиц (с 300 до 150 nm) не приводит к каким-либо качественным изменениям: можно заметить лишь незначительное увеличение размера ячейки, обусловленное изменением кинетики горения алюминия. Зависимость скорости волны от плотности частиц диаметром

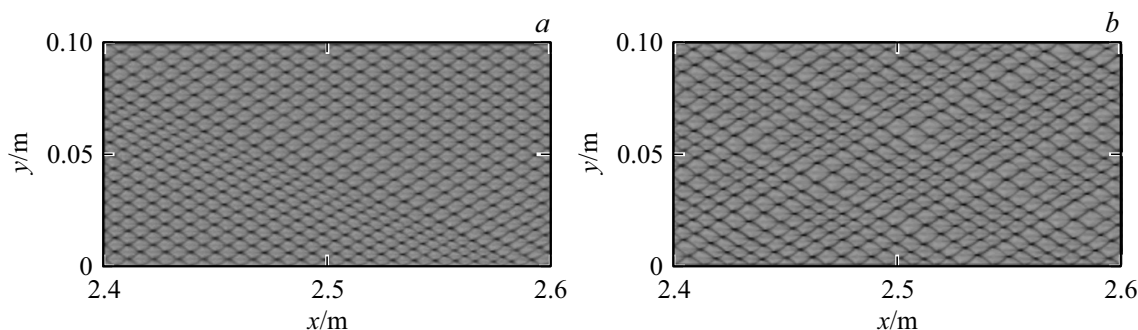


Рис. 3. Картины тройных точек установившейся гибридной детонации для $\rho_{20} = 50 \text{ g/m}^3$. $d = 300$ (a) и 150 nm (b).

150 nm качественно совпадает с результатами, представленными на рис. 2.

Таким образом, установлено, что добавление незначительной массы субмикронных алюминиевых частиц в горючую газовую смесь обеспечивает стабилизацию течения и регуляризацию ячеек и может привести к увеличению скорости детонации при $\varphi = 0.6$ на 15% (с 1.7 до 1.94 km/s). Эффект менее выражен в смесях с большим коэффициентом избытка топлива. Также в рассматриваемых взвесах субмикронных частиц не наблюдается формирования двухфронтовых режимов, свойственных гибридным смесям с микронными частицами диаметром более $3.5 \mu\text{m}$.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 21-79-10083, <https://rscf.ru/project/21-79-10083/>).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Taveau, S. Hochgreb, S. Lemkowitz, D. Roekaerts, J. Loss *Prev. Process Ind.*, **51**, 84 (2018). DOI: 10.1016/j.jplp.2017.11.011
- [2] B.A. Khasainov, B. Veysiere, in *Dynamics of explosions* (American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1988), p. 284. DOI: 10.2514/5.9781600865886.0284.0299
- [3] B. Veysiere, B.A. Khasainov, *Combust. Flame*, **85**, 241 (1991). DOI: 10.1016/0010-2180(91)90191-D
- [4] B.A. Khasainov, B. Veysiere, *Shock Waves*, **6**, 9 (1996). DOI: 10.1007/BF02511399
- [5] B. Veysiere, W. Ingnoli, *Shock Waves*, **12**, 291 (2003). DOI: 10.1007/s00193-002-0168-8
- [6] Т.А. Хмель, С.А. Лаврук, *Челяб. физ.-мат. журн.*, **8** (4), 580 (2023). DOI: 10.47475/2500-0101-2023-8-4-580-593
- [7] Т.А. Хмель, С.А. Лаврук, А.А. Афанасенков, *Челяб. физ.-мат. журн.*, **8** (3), 371 (2023). DOI: 10.47475/2500-0101-2023-8-3-371-386
- [8] D.S. Sundaram, V. Yang, V.E. Zarko, *Combust. Explos. Shock Waves*, **51**, 173 (2015). DOI: 10.1134/S0010508215020045

- [9] Т.А. Khmel, *Combust. Explos. Shock Waves*, **55**, 580 (2019). DOI: 10.1134/S0010508219050095
- [10] A.V. Fedorov, Т.А. Khmel, *Combust. Explos. Shock Waves*, **41**, 435 (2005). DOI: 10.1007/s10573-005-0054-7
- [11] I.A. Bedarev, K.V. Rylova, A.V. Fedorov, *Combust. Explos. Shock Waves*, **51**, 528 (2015). DOI: 10.1134/S0010508215050032
- [12] И.А. Бедарев, В.М. Темербеков, *Письма в ЖТФ*, **47** (14), 8 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.14.51178.18627 [I.A. Bedarev, V.M. Temerbekov, *Tech. Phys. Lett.*, **47**, 695 (2021). DOI: 10.1134/S1063785021070166].
- [13] I.A. Bedarev, V.M. Temerbekov, *Int. J. Hydrogen Energy*, **47**, 38455 (2022). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.08.307
- [14] G. Ciccarelli, T. Ginsberg, J. Boccio, C. Economos, K. Sato, M. Kinoshita, *Combust. Flame*, **99**, 212 (1994). DOI: 10.1016/0010-2180(94)90124-4