

03

Управление процессами детонации водородно-воздушных смесей добавками микродисперсных частиц алюминия

© Т.А. Хмель, С.А. Лаврук, А.А. Афанасенков

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия
E-mail: khmel@itam.nsc.ru

Поступило в Редакцию 21 января 2025 г.

В окончательной редакции 14 апреля 2025 г.

Принято к публикации 15 апреля 2025 г.

Представлены результаты численного моделирования ячеистой детонации водородно-воздушных смесей с добавками микродисперсных частиц алюминия. Установлено влияние размера и загрузки частиц на характеристики процесса. Показано многообразие форм ячеистой детонации (с регулярной и нерегулярной ячейкой, с косоугольными ячейками и наклонным фронтом) в зависимости от распределения частиц в пространстве. Продемонстрировано развитие комбинированной неустойчивости при слоевом распределении частиц. Полученные результаты позволяют рассматривать добавки частиц алюминия как управляющий фактор реализации различных режимов детонации в водородсодержащих гибридных смесях.

Ключевые слова: детонация, газовзвеси, водородно-воздушная смесь, частицы алюминия, численное моделирование.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.14.60762.20262

Добавки мелкодисперсных порошков алюминия представляют интерес с точки зрения ускорения воспламенения и увеличения теплового эффекта сгорания топливных смесей. Возможность значительного увеличения скорости детонации водород-кислородных и водородно-воздушных смесей с частицами алюминия отмечена в экспериментах [1,2], где также наблюдались двухфронтные структуры. В [3] экспериментально исследовалось влияние дисперсности и загрузки частиц на характеристики ячеистой гибридной детонации, установлена связь между скоростью детонации и размером ячейки. С точки зрения управления течениями частицы алюминия предоставляют широкие возможности за счет изменения дисперсности (так как время горения зависит от размера частиц), фракционного состава, распределения облаков частиц в пространстве. Физико-математическая модель и некоторые результаты расчетов детонации в разбавленной водород-кислородной и водородно-воздушных взвесьях частиц алюминия малой загрузки и однородного состава приведены в [4–6]. В настоящей работе используется расширенная модель, включающая в рассмотрение реакцию взаимодействия алюминия с парами воды, применимая к смесям достаточно большой загрузки (до 500 g/m^3) с неоднородным распределением частиц алюминия в пространстве. Целью работы является оценка управляющих факторов детонационного процесса: влияние загрузки частиц, их распределения в пространстве, дисперсности на качественные свойства ячеистой детонации гибридных смесей.

Рассматривается плоский канал, заполненный газовой смесью вида $2\varphi\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.82\text{N}_2$, в которой диспергировано некоторое облако частиц алюминия. Облако может занимать все пространство или только часть поперечного сечения канала. Распределение частиц в

облаке может быть как однородным, так и неоднородным. Будут рассмотрены случаи поперечного градиента или разрыва средней плотности частиц. Инициирование детонации и развитие поперечных волн обеспечиваются разрывом наклонной диафрагмы, отделяющей камеру высокого давления. Анализируется установившийся режим ячеистой детонации после ослабления инициируемой пересжатой волны волнами разрежения.

Физико-математическая модель является расширением модели, представленной в [4]. Описание течений двухфазной смеси проводится в рамках механики гетерогенных сред. В рассмотрение принимаются газ и два дискретных компонента: частицы алюминия и наноразмерные частицы образующегося оксида алюминия. В газовой фазе учитываются водород, кислород, азот, пары воды и смесь газообразных продуктов горения алюминия (доминируют AlO , Al_2O , AlOH), рассматриваемая как единый компонент. Горение водородно-воздушной смеси описывается в рамках модели приведенной кинетики [7]. Одностадийная модель [7] является достаточно простой, тем не менее дает хорошее согласование с данными экспериментов по задержкам воспламенения, скоростям детонации и размерам детонационной ячейки в разбавленных аргоном водород-кислородных и водородно-воздушных смесях стехиометрического состава. Модель была успешно опробована на ряде задач в [8,9]. Нами внесены поправки на бедные по водороду смеси: интегральное тепловыделение линейно зависит от коэффициента избытка топлива $Q_1 = -0.19 + 0.06\varphi \text{ [MJ/mol]}$, $0.4 \leq \varphi \leq 1$ [5]. Данная аппроксимация обеспечивает соответствие экспериментальной зависимости [10] скорости детонации от φ . Горение алюминия описывается уравнениями приведенной кинетики аррениусовского типа. Предполагается, что при взаимодействии алюминия

с кислородом образуются либо конденсированные наночастицы оксида алюминия (ниже температуры кипения алюминия, зависящей от давления), либо газообразные субокислы. Стехиометрические коэффициенты гетерогенной и гомогенной реакций взаимодействия с кислородом отвечают соотношениям $2\text{Al} + 1.5\text{O}_2 \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3$ и $2\text{Al} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{AlO}$ соответственно. Условие перехода от гетерогенной к гомогенной реакции имеет вид зависимости температуры кипения алюминия (T_{2b}) от давления: $T_2 = T_{2b} = 2960p^{0.087}$, где T_2 [K], p [atm] — температура частиц алюминия и давление газа [11]. Тепловые эффекты сгорания алюминия в водородно-воздушной среде принимались следующими: при образовании частиц оксида алюминия $Q_{23} = 15 \text{ MJ/kg}$ и при образовании газообразных субокислов $Q_{21} = 4.5 \text{ MJ/kg}$ [5]. Взаимо-

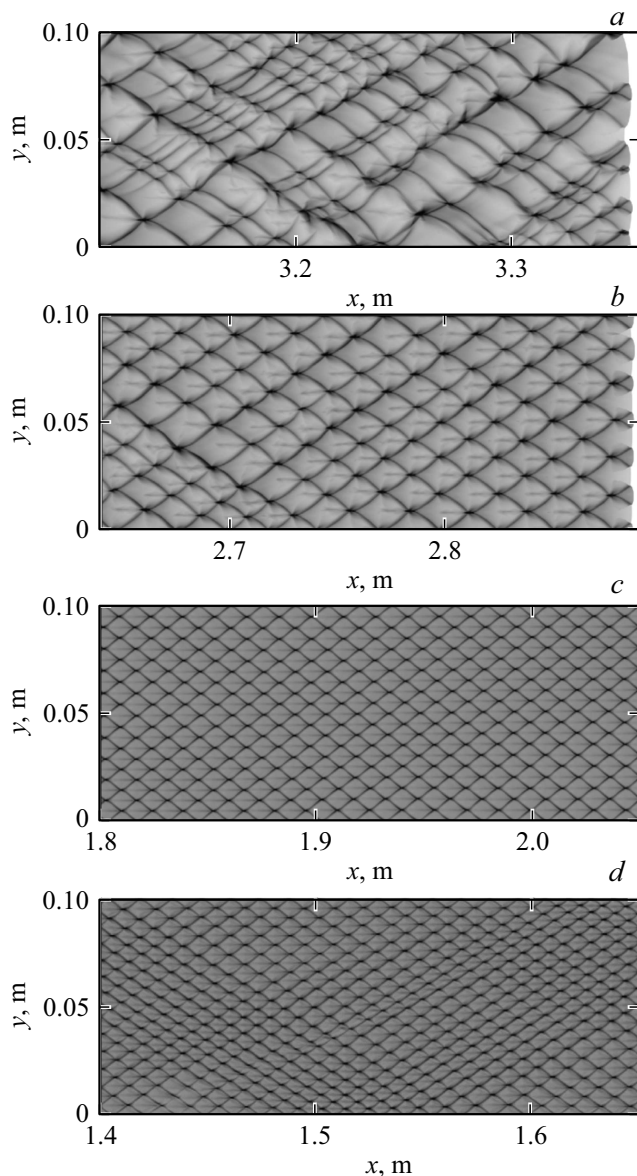


Рис. 1. Картины тройных точек газовой (a) и гибридной (b–d) детонации при $\varphi = 0.6$, $d = 1 \mu\text{m}$. $\rho_{20} = 10$ (b), 50 (c) и 100 g/m^3 (d).

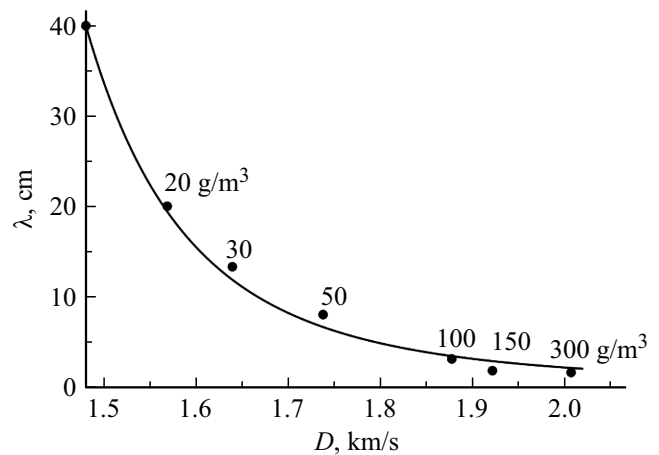


Рис. 2. Зависимость скорости детонации и размера ячейки от загрузки частиц в гибридной смеси с $\varphi = 0.4$. Сплошная линия — аппроксимационная зависимость [3].

действие с парами воды ($\text{Al} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{AlOH} + \text{H}$) происходит с образованием газообразных продуктов, тепловой эффект реакции $Q_{22} = 4 \text{ MJ/kg}$. Расчетные зависимости скорости детонации от концентрации частиц попадают в интервал между данными экспериментов [3] при $\varphi = 0.87$ и данными термодинамических расчетов, выполненных по программе [12], в интервале $0.4 < \varphi < 1$. Также хорошо согласуются расчетные картины ячейистой детонации в газовой и гибридной смесях с $\varphi = 0.87$ [5] с экспериментальными [3].

Рассматриваются бедные водородно-воздушные смеси ($\varphi = 0.6, 0.4$), детонация которых характеризуется нерегулярной ячейкой. В смеси с $\varphi = 0.6$ добавка даже малого количества (10 g/m^3) частиц алюминия диаметром $1 \mu\text{m}$ обеспечивает стабилизацию течения и регуляризацию ячейистой структуры (рис. 1, поля параметра $p_{\max}(x, y) = \max_t p(x, y, t)$). Для газовой детонации ячейистая структура является нерегулярной (рис. 1, a). С ростом загрузки частиц увеличивается скорость детонации, уменьшается размер ячейки и сокращается путь (и время) формирования равномерной регулярной структуры от 2.8 м при 10 g/m^3 (рис. 1, b) до 1.8 м при 50 g/m^3 (рис. 1, c). При загрузке 100 g/m^3 мелкоячейстая слегка неравномерная структура формируется к 1.4 м и далее не меняется (рис. 1, d).

Данные по скоростям установившейся детонации и размерам ячеек в смеси с $\varphi = 0.4$ при различных загрузках частиц показаны на рис. 2. В газовой смеси детонация характеризуется крупной ячейкой (около 40 см [13]), в расчетах в канале 20 см формируется структура с одной поперечной волной (рис. 3, a). Заметный прирост скорости детонации достигается при добавках частиц алюминия $50\text{--}100 \text{ g/m}^3$, далее кривая зависимости выполаживается и выходит на „полочку“. Связь между скоростью детонации (D) и размером ячейки (λ) отвечает функциональной зависимости, приве-

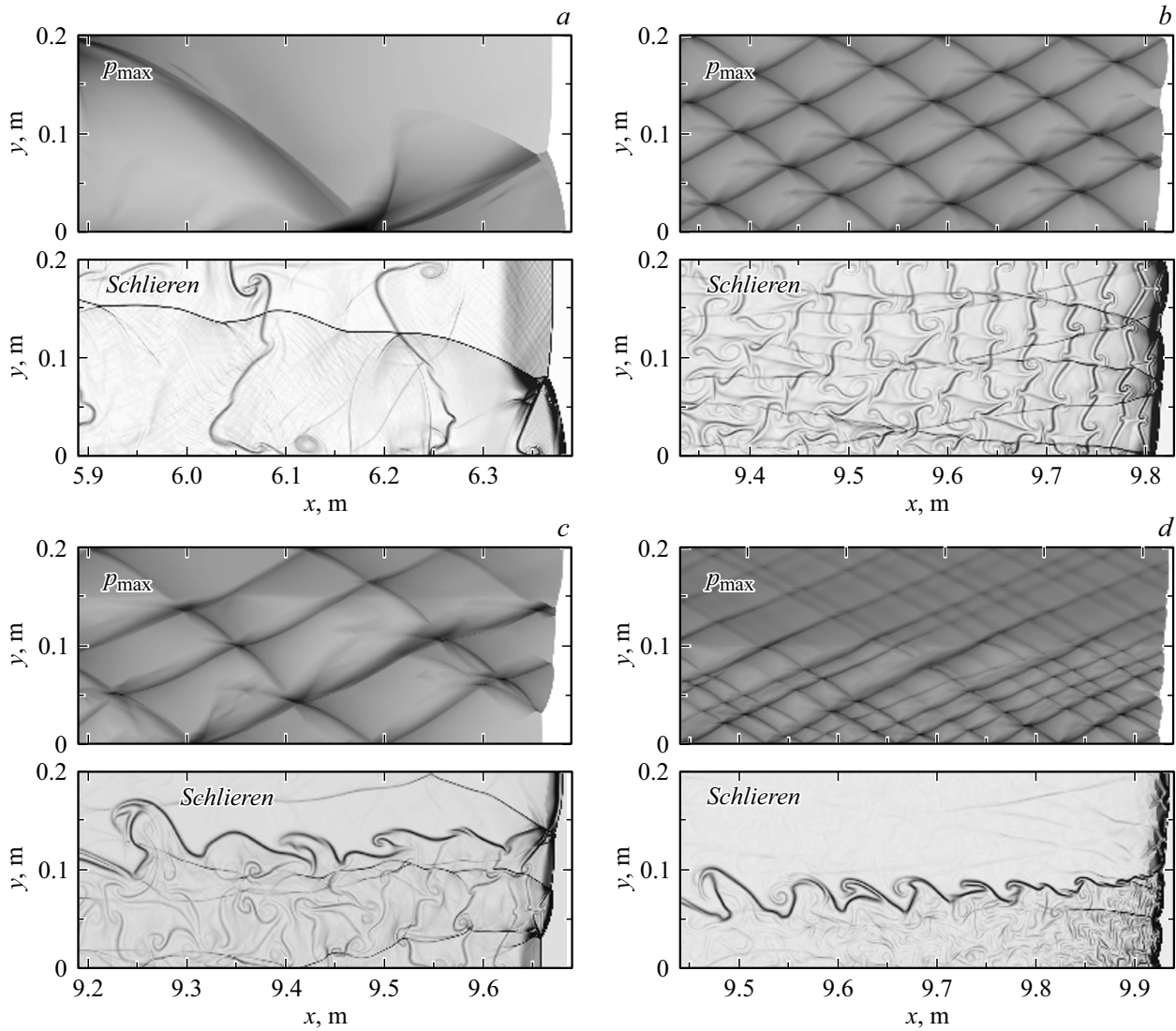


Рис. 3. Картины ячейистой детонации в газовой смеси с $\varphi = 0.4$ (a) и в смеси с частицами градиентного распределения: $\rho_{2bot} = 0$, $\rho_{2top} = 100 \text{ g/m}^3$ (b), при слоевой загрузке частиц ($\rho_{20} = 300 \text{ g/m}^3$) при $h/H = 0.25$ (c) и 0.5 (d).

денной в [3]: $\lambda = \lambda_0 \delta \exp[E/RT_{ZND}(\delta^{-2} - 1)]$, $\delta = D/D_0$, где λ_0 , D_0 — размер детонационной ячейки и скорость детонации для газовой смеси, T_{ZND} — температура газа в точке Чепмена-Жуге газовой детонации, для $\varphi = 0.4$ определено $E/RT_{ZND} = 7.1$ (сплошная линия на рис. 2).

Для анализа влияния неоднородности облака частиц рассмотрено два типа распределения частиц в плоском канале: с градиентом средней плотности от нижней стенки к верхней (когда плотность частиц постепенно меняется от ρ_{2bot} в нижней части канала до ρ_{2top} у верхней стенки канала) и с разрывом плотности (слоевое распределение). Наиболее существенные отличия от равномерного распределения частиц проявляются в диапазоне концентраций от $\rho_{2bot} = 0$ до $\rho_{2top} = 100 \text{ g/m}^3$. При градиентном распределении формируются косоугольные ячейки с наклонным лидирующим фронтом (рис. 3, b), аналогичные картинам гетерогенной детонации с поперечным градиентом концентрации [14].

При слоевом распределении частиц возможны различные картины ячейистых структур в зависимости от загрузки и относительной высоты слоя. Примеры для бедной по водороду смеси с высокой загрузкой частиц и различной высотой слоя (примыкающего к верхней стенке канала 20 см) показаны на рис. 3, c, d. Здесь при $h/H = 0.25$ формируются две косоугольные ячейки (рис. 3, c), а при $h/H = 0.5$ (рис. 3, d) — нерегулярная структура с разноразмерными ячейками (более крупными снизу и мелкими сверху), причем, как заметно из рис. 3, d, поперечные волны в верхней части канала „размыты“, что свидетельствует о сниженной интенсивности и дисперсном характере поперечных волн. Анализ профилей давления на верхней стенке в различные моменты времени в смеси с загрузкой части алюминия $\rho_{20} = 300 \text{ g/m}^3$ показал уменьшение амплитуды колебаний относительно смеси с загрузкой частиц $\rho_{20} = 100 \text{ g/m}^3$. Подобное явление „вырождения“ ячеек

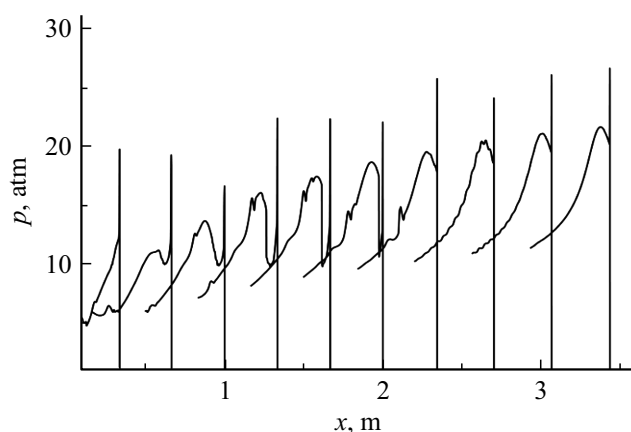


Рис. 4. Сценарий промежуточного формирования двухфронтных конфигураций в гибридной смеси с $\varphi = 0.6$, $d = 5 \mu\text{m}$. Профили давления с шагом 0.2 ms .

отмечено и обосновано в [15] методами акустического анализа структуры гетерогенной детонации в бидисперсных взвесах частиц алюминия. Из рис. 3, с и d также видно, что на границе слоя газозвеси развивается неустойчивость комбинированного типа: Кельвина—Гельмгольца (вследствие различия скоростей потока за фронтом в газе и газозвеси) и Рихтмайера—Мешкова (вследствие воздействия поперечных волн на поверхность слоя).

Варьирование размера частиц в пределах $1\text{--}5 \mu\text{m}$ показало незначительное влияние на установившиеся структуры и скорости детонации, как и в [4]. Однако сценарии формирования, так же как и в смесях водород—кислород—аргон, включают образование двухфронтных конфигураций, которые существуют ограниченное время, затем сливаются в стандартную структуру с одним лидирующим фронтом и системой поперечных волн. Пример такого сценария приведен на рис. 4, где двухфронтная структура наблюдается на трех профилях в интервале $1.25\text{--}2 \text{ m}$. Как видно, расстояние между лидирующим фронтом и вторичным фронтом сокращается. После слияния фронтов происходит резкое возрастание скорости распространения и давлений в точке химпика (максимального энерговыделения в результате химической реакции, что свидетельствует о возрастании давления при $x > 2.3 \text{ m}$ на рис. 4).

Таким образом, в работе продемонстрировано многообразие картин ячеистой детонации в смеси реагирующих газов (водородно-воздушной смеси) и реагирующих частиц (мелкодисперсных частиц алюминия) в зависимости от состава газовой смеси, загрузки частиц и распределения частиц в пространстве. Полученные данные позволяют рассматривать добавки частиц алюминия в водород-кислородные и водородно-воздушные газовые смеси как одно из возможных средств управления характеристиками детонации.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект 24-29-00336, <https://rscf.ru/project/24-29-00336/>).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] B.A. Khasainov, B. Veyssiere, in *Dynamics of explosions* (AIAA, 1988), p. 284. DOI: 10.2514/5.9781600865886.0284.0299
- [2] W. Wu, Y. Wang, K. Wu, Z. Ma, W. Han, J. Wang, G. Wang, M. Zhang, *Int. J. Hydrog. Energy*, **48**, 24089 (2023). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.03.078
- [3] B. Veyssiere, W. Ingnoli, *Shock Waves*, **12**, 291 (2003). DOI: 10.1007/s00193-002-0168-8
- [4] T.A. Khmel, S.A. Lavruk, *Combust. Explos. Shock Waves*, **60**, 374 (2024). DOI: 10.1134/S0010508224030109
- [5] A.A. Афанасенков, Т.А. Хмель, *Челяб. физ.-мат. журн.*, **9** (2), 177 (2024). DOI: 10.47475/2500-0101-2024-9-2-177-186
- [6] Т.А. Хмель, С.А. Лаврук, *Письма в ЖТФ*, **50** (8), 37 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.08.57519.19832 [Т.А. Khmel, S.A. Lavruk, *Tech. Phys. Lett.*, **50** (4), 76 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.08.57519.19832].
- [7] I.A. Bedarev, K.V. Rylova, A.V. Fedorov, *Combust. Explos. Shock Waves*, **51**, 528 (2015). DOI: 10.1134/S0010508215050032
- [8] 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].
- [9] I.A. Bedarev, V.M. Temerbekov, *Int. J. Hydrog. Energy*, **47**, 38455 (2022). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.08.307
- [10] 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
- [11] D.S. Sundaram, V. Yang, V.E. Zarko, *Combust. Explos. Shock Waves*, **51** (2), 173 (2015). DOI: 10.1134/S0010508215020045
- [12] B.J. McBride, *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications* [Электронный ресурс]. <https://cearun.grc.nasa.gov/>
- [13] S.R. Tieszen, M.P. Sherman, W.B. Benedick, J.E. Shepherd, R. Knystautas, J.H.S. Lee, in *Dynamics of explosions* (AIAA, 1986), p. 205. DOI: 10.2514/5.9781600865800.0205.0219
- [14] T.A. Khmel, S.A. Lavruk, *Combust. Explos. Shock Waves*, **58**, 253 (2022). DOI: 10.1134/S0010508222030017
- [15] A.V. Fedorov, T.A. Khmel', *Combust. Explos. Shock Waves*, **44**, 343 (2008). DOI: 10.1007/s10573-008-0042-9