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 двухфронтовые 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 взвесях 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 $500\,\mathrm{g/m^3}$) 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 $2\varphi H_2 + O_2 + 3.82N_2$, 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 $Q_1 = -0.19 + 0.06\varphi\,[\mathrm{MJ/mol}]$, $0.4 \leqslant \varphi \leqslant 1$ [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 $2Al + 1.5O_2 \rightarrow Al_2O_3$ и $2Al + O_2 \rightarrow 2AlO$ соответственно. Условие перехода от гетерогенной к гомогенной реакции имеет вид зависимости температуры кипения алюмния (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 $Q_{23} = 15$ MJ/kg и при образовании газообразных субокислов $Q_{21} = 4.5$ MJ/kg [5]. Взаимодействие с парами воды ($Al + H_2O \rightarrow AlOH + H$) происходит с образованием газообразных продуктов, тепловой эффект реакции $Q_{22} = 4$ 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 ячеистой детонации в газовой и гибридной смесях с $\varphi = 0.87$ [5] с экспериментальными [3].

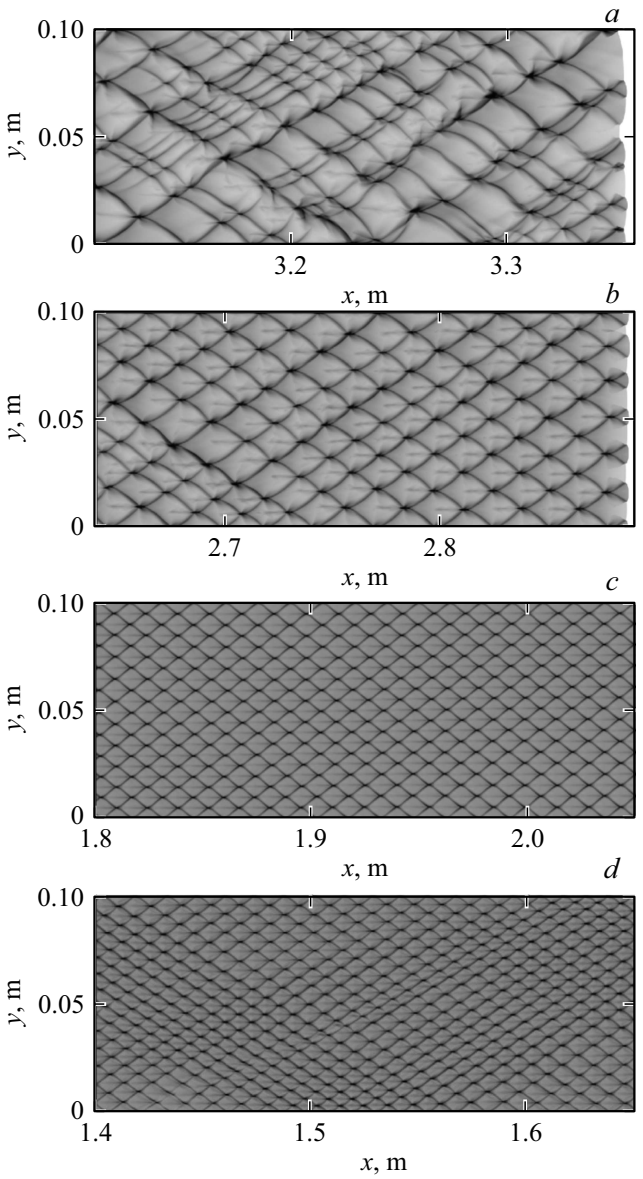

Рис. 1. Картины тройных точек газовой (a) и гибридной (b–d) детонации при $\varphi = 0.6$, $d = 1\,\mu$m. $\rho_{20} = 10$ (b), 50 (c) и 100 g/m^3 (d).

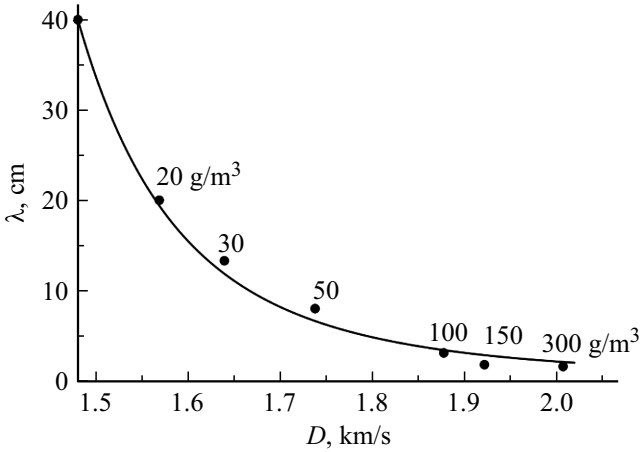

Рис. 2. Зависимость скорости детонации и размера ячейки от загрузки частиц в гибридной смеси с $\varphi = 0.4$. Сплошная линия — аппроксимационная зависимость [3].

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 $1\,\mu$m обеспечивает стабилизацию течения и регуляризацию ячеистой структуры (рис. 1, поля параметра $p_{\max}(x, y) = \max\limits_t p(x, y, t)$). Для газовой детонации ячеистая 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 m при 10 g/m^3 (рис. 1, b) до 1.8 m при 50 g/m^3 (рис. 1, c). При загрузке 100 g/m^3 мелкоячеистая слегка неравномерная структура формируется к 1.4 m 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 cm [13]), в расчетах в канале 20 cm формируется структура с одной поперечной волной (рис. 3, a). Заметный прирост скорости детонации достигается при добавках частиц алюминия 50–100 g/m^3, далее кривая зависимости выполаживается и выходит на „полочку“. Связь между скоростью детонации (D) и размером ячейки (λ) отвечает функциональной зависимости, приве-

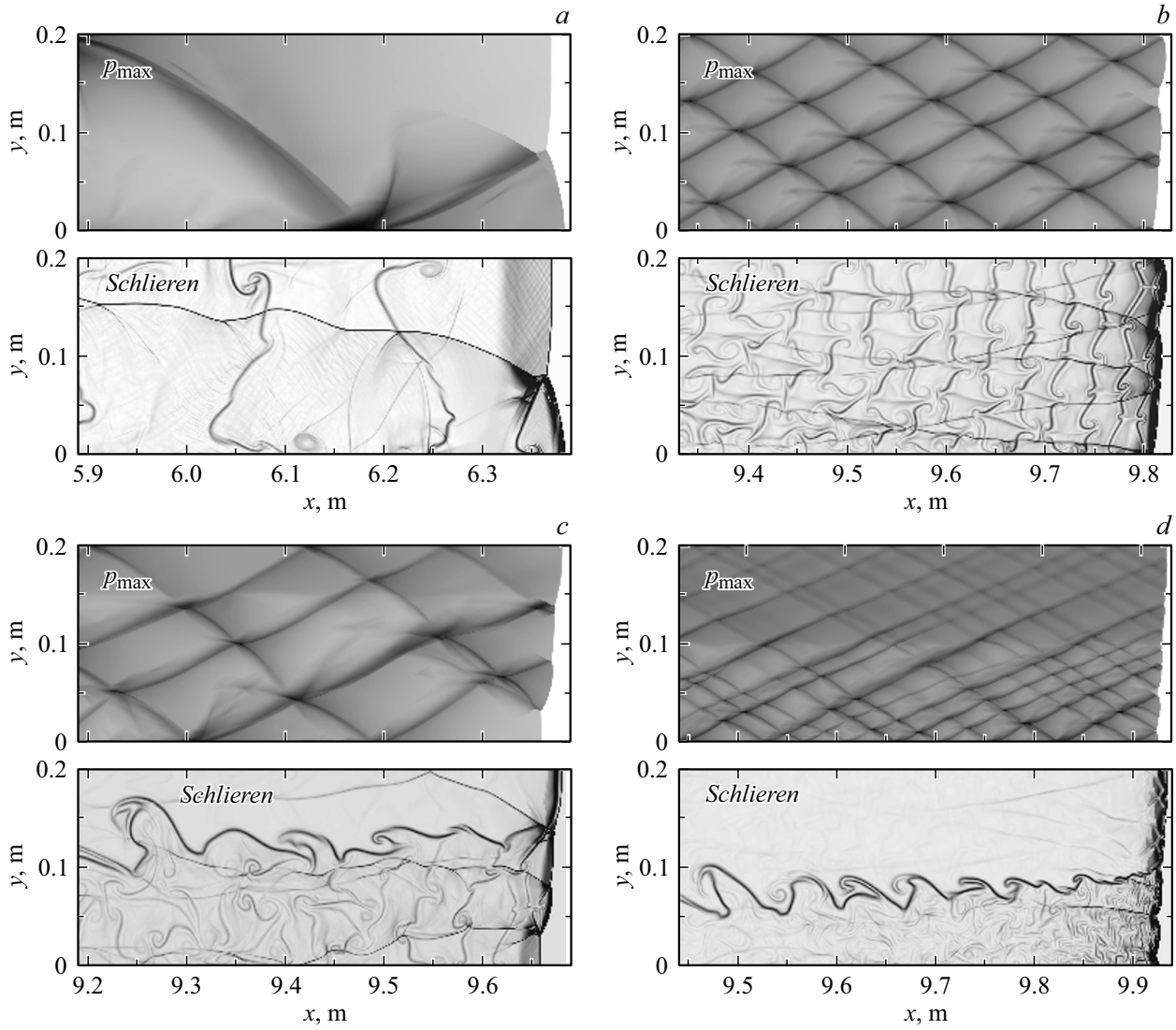

Рис. 3. Картины ячеистой детонации в газовой смеси с $\varphi = 0.4$ (*a*) и в смеси с частицами градиентного распределения: $\rho_{2bot} = 0$, $\rho_{2top} = 100\,\mathrm{g/m^3}$ (*b*), при слоевой загрузке частиц ($\rho_{20} = 300\,\mathrm{g/m^3}$) при $h/H = 0.25$ (*c*) и 0.5 (*d*).

денной в [3]: $\lambda = \lambda_0 \delta \exp[E/RT_{\mathrm{ZND}}(\delta^{-2} - 1)]$, $\delta = D/D_0$, 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 $E/RT_{\mathrm{ZND}} = 7.1$ (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 $\rho_{2top} = 100\,\mathrm{g/m^3}$. 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 ячеистых 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 cm) 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 $\rho_{20} = 300\,\mathrm{g/m^3}$ показал уменьшение амплитуды колебаний относительно смеси с загрузкой частиц $\rho_{20} = 100\,\mathrm{g/m^3}$. Подобное явление „вырождения“ ячеек

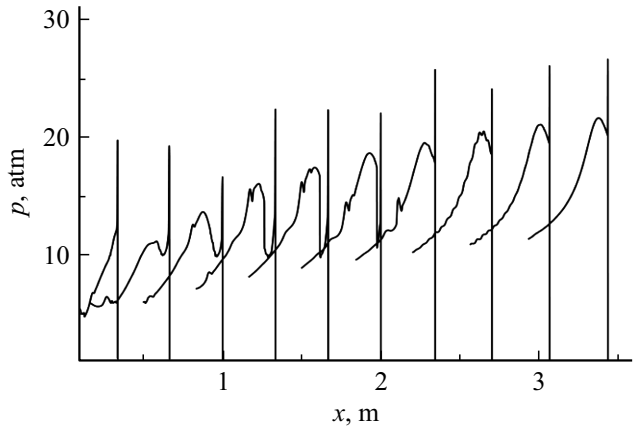

Рис. 4. Сценарий промежуточного формирования двухфронтовых конфигураций в гибридной смеси с $\varphi = 0.6$, $d = 5\,\mu$m. Профили давления с шагом 0.2 ms.

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

Варьирование размера частиц в пределах $1-5\,\mu$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 двухфронтовых 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 двухфронтовая структура наблюдается на трех профилях в интервале $1.25-2$ 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 $x > 2.3$ 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. Ingignoli, 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] А.А. 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 [T.A. 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 chemcal 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