

УДК 533.6

## **Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом**

**Гидаспов В. Ю.**

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ,*

*Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия*

*e-mail: gidaspov@mai.ru*

### **Аннотация**

Приводятся результаты численных исследований воспламенения и детонации горючей смеси дисперсных частиц магния с воздухом. Разработана упрощенная физико-математическая модель процесса. Дисперсные частицы считаются двухкомпонентными и состоящими из магния и оксида магния, учитываются процессы плавления и испарения материала, а также поверхностная реакция образования оксида магния. Несущий газ является многокомпонентным, находящимся в состоянии термодинамического равновесия, при этом учитывается наличие в продуктах сгорания мелкодисперсных частиц магния, оксида магния и нитрида магния. Расчетным путем определены структура и минимальная скорость распространения стационарной детонационной волны и максимальная скорость потока при стационарном горении. Показано, что вычисленные в волнах параметры асимптотически стремятся к своим равновесным значениям. Разработанные физико-математическая модель и вычислительные алгоритмы могут быть использованы при создании методик моделирования горения и детонации металлогазовых смесей в многомерной постановке.

### **Ключевые слова**

численное моделирование, металлизированные топлива, химические реакции, фазовые переходы, горение, детонации

### **Введение**

В настоящее время большой теоретический и практический интерес вызывают задачи образования и распространения волн горения и детонации в многофазных средах, состоящих из частиц горючего и газообразного окислителя. Особый интерес среди них представляют проблемы, связанные с горением и детонацией частиц металлов. В частности, частицы металлов используются в смесевых твердых ракетных топливах в качестве добавок

повышающих теплоту сгорания [1, 2]. Горение газозвесей металлических частиц сопровождается протеканием поверхностных и газофазных химических реакций, образованием конденсированных продуктов на поверхности частицы и в продуктах сгорания. Обзоры результатов экспериментальных и расчетно-теоретических исследований горения частиц металлов содержатся в большом количестве статей и монографий [1-6].

Исследуется процесс самовоспламенения, горения и детонации мелкодисперсной взвеси магния в воздухе в канале постоянного сечения в двух постановках: за ударной волной, распространяющейся с постоянной скоростью; после впрыска частиц в высокотемпературный поток. Считается, что магнием одновременно участвует в реакциях изменения состава капли (образования оксида магния) и испарения. В газовой фазе происходят химические превращения, приводящие к образованию соединений магния с кислородом и азотом, количество и фазовый состав которых существенно зависит от соотношения магния и кислорода в горючей смеси. Процесс сгорания заканчивается установлением скоростного, температурного, фазового и химического равновесия.

### **Физико-математическая модель**

При построении физико-математической модели процесса, считается, что течение одномерное; объемная доля частиц в газе мала; эффекты вязкости теплопроводности и диффузии существенны только при взаимодействии частиц с газом; химические реакции протекают в газовой фазе и на поверхности частиц. Дробление и коагуляция частиц не рассматриваются. Температура воздуха приводящая к воспламенению газозвесей частиц магния в воздухе может быть ниже температуры плавления магния [1], поэтому в работе предполагается, что в химических реакциях с кислородом участвует как “жидкий”, так и “твердый” магний. Скорость реакции окисления прямо пропорциональна температуре частицы, концентрации кислорода и площади поверхности частицы занятой магнием. В процессе горения в поток газа поступают продукты испарения магния и оксида магния, которые вступают в экзотермические газофазные химические реакции с окислителем. Температура при горении частиц магния в воздухе может превышать 3000 К, поэтому считается, что газофазные химические реакции протекают равновесно, при этом учитывается возможность образования в продуктах сгорания мелкодисперсных частиц магния, оксида магния и нитрида магния.

Стационарные двухфазные течения, возникающие в канале постоянного сечения за стационарной ударной волной (УВ), распространяющейся по горючей смеси со скоростью  $D$  и после впрыска частиц в начальном сечении, при сделанных выше предположениях

описываются аналогичной, используемой в [7], системой дифференциально-алгебраических уравнений (1)-(2):

$$\begin{aligned} \rho v + n_s m_s v_s &= \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \\ \rho v + p + n_s m_s v_s^2 &= \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2 \\ \rho v \left( e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) + n_s m_s v_s \left( e_s + \frac{v_s^2}{2} \right) &= \rho_0 v_0 \left( e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left( e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0}$$

$$\frac{d\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} = W_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$v_s \frac{dm_{si}}{d\xi} = \dot{m}_{si} = W_i \mu_i / n_s, \quad i = N+1, \dots, N+N_s \quad (2)$$

$$v_s \frac{du_s}{d\xi} = \dot{u}_s$$

$$v_s \frac{dm_s H_s}{d\xi} = \dot{H}_s$$

Здесь  $\rho, p, e, \gamma_i, \mu_i$  - плотность, давление, внутренняя энергия и мольно-массовые концентрации и молекулярные веса компонент, соответственно;  $n_s, m_s, e_s, H_s, \gamma_{is}, m_{si}$  - число частиц в единице объема, масса, внутренняя энергия, энтальпия, число молей  $i$ -ого вещества в килограмме массы частицы, масса  $i$ -ого вещества в частице, соответственно;  $\dot{u}_s, \dot{H}_s, \dot{m}_{si}$  - выражения, описывающие скорость изменения скорости, энтальпии и массы  $i$ -ого вещества частицы;  $W_i$  - число молей  $i$ -ого вещества образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых переходов. В системе уравнений (1)-(2) в список из  $N$  веществ в газовой фазе могут входить конденсированные компоненты. Вещества, входящие в состав дисперсной частицы нумеруются индексами  $N+1, \dots, N+N_s$ .

При рассмотрении течения за УВ:  $\xi = Dt - x$  (расстояние от ударной волны до рассматриваемой точки  $x, t$  - время),  $v = D - u, v_s = D - u_s$  - скорость газа и частиц относительно УВ, индексом "0" обозначены параметры перед УВ. В случае впрыска частиц  $\xi \equiv x, v \equiv u, v_s \equiv u_s$ , индексом "0" обозначены параметры в сечении впрыска.

Для замыкания системы (1)-(2) используются модели термодинамики, химической кинетики, сопротивления и тепломассообмена, аналогичные приведенным в [8-10]. Необходимо отметить, что существует минимальная скорость ударной волны  $D$  и максимальная скорость газа  $v$  при которой рассматриваемая система имеет решение [11].

Для интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2) используется модифицированный метод У.Г.Пирумова [8], на каждой итерации которого с высокой точностью решается система нелинейных алгебраических уравнений (1). Метод интегрирования обеспечивает точное выполнение законов сохранения элементного состава.

Рассматривается случай, когда газовая фаза представляет из себя смесь совершенных газов, в которой химические превращения протекают равновесно.

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = \sum_{r=1}^{N_r} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) = 0, \quad i = 1, \dots, N \quad (3)$$

Здесь  $N_r$  - число реакций в газовой фазе,  $\bar{v}_i^{(r)}$  - стехиометрические коэффициенты,  $\bar{W}^{(r)}$  - скорости химических реакций. В состоянии термодинамического равновесия концентрации  $\gamma_i$  являются неявно заданными функциями удельного объема ( $V \equiv \frac{1}{\rho}$ ), температуры ( $T$ ) и элементного состава  $\gamma_k^0, k=1, \dots, N_e$ :

$$\gamma_i = \gamma_i(V, T, \gamma_1^0, \dots, \gamma_{N_e}^0), \quad i = 1, \dots, N, \quad (4)$$

и могут быть рассчитаны по методике приведенной в [7].

Неравновесными считаются процессы тепломассообмена между газом и частицами, а также поверхностные реакции:

$$\sum_{r=N_r+1}^{N_r+N_{rs}} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) = \sum_{r=1}^{N_{rs}} \dot{m}_i^r \neq 0. \quad (5)$$

Выражение для потока массы  $i$ -ого компонента в реакции испарения (конденсации) (5), в соответствии с [5, 12], в первом приближении может быть записано в виде:

$$\dot{m}_i^r = -2\pi d \frac{m_{Si} \rho_s}{\rho_{Si} m_s} D_i \rho \ln \left( \frac{1 - \alpha_i \tilde{\gamma}_i \mu_i}{1 - \alpha_i \gamma_i^s \mu_i} \right). \quad (6)$$

Здесь  $d$  - диаметр частицы,  $\rho_s$  - плотность частицы,  $\rho_{Si}$  - плотность  $i$ -ого вещества, входящего в состав частицы,  $\alpha_i$  - параметр, зависящий от кинетики межфазного массообмена ( в расчетах  $\alpha_i = 1$ ). В качестве  $\tilde{\gamma}_i$  берется сумма концентраций компонент в газообразном и конденсированном состояниях в газовой фазе, входящего в состав частицы вещества. При таком подходе состояние частичного равновесия, полученное в [7] не наблюдается.

Выражение для потока тепла  $Q$  от газа к частице, может быть записано [5, 12]:

$$Q = \frac{\bar{C}_p \sum_i \dot{m}_{si} (T - T_s)}{\frac{\bar{C}_p \sum_i \dot{m}_{si}}{e^{\frac{i}{2m_s \bar{\lambda}}} - 1}}. \quad (7)$$

Коэффициенты диффузии -  $\bar{D}_i$ , теплопроводности -  $\bar{\lambda}$ , теплоемкость -  $\bar{C}_p$  и плотность -  $\rho$  вычисляются по средним значениям в окрестности частицы [12]. При наличии химических реакций уравнение для нахождения температуры частицы имеет вид [7]:

$$\frac{dm_s H_s}{dt} = Q + \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rs}} \sum_{i=1}^N (\bar{v}_i^{(r)} - v_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) \frac{\mu_i}{n_s} H_i(T_s) \quad (8)$$

В процессе окисления частица становится многокомпонентной и состоит из магния ( $Mg$ ) и оксида магния ( $MgO$ ). В процессе теплового взаимодействия с воздухом частица нагревается и ее температура может достигать как температуры плавления магния ( $T_m^{Mg} = 923 K$ ), так и температуры плавления оксида магния ( $T_m^{MgO} = 3100 K$ ). Считается, что процесс плавления происходит равновесно, соответственно энтальпию частицы можно представить как сумму энтальпий компонент, входящих в её состав:

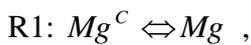
$$H_s(T) = \gamma_{Mg}^s H_{Mg}^s(T) + \gamma_{Mg}^l H_{Mg}^l(T) + \gamma_{MgO}^s H_{MgO}^s(T) + \gamma_{MgO}^l H_{MgO}^l(T) \quad (9)$$

Здесь верхние индексы относятся “s” к твердой и “l” к жидкой фазам, при этом содержание магния и оксида магния в частице равно сумме соответствующих концентраций:

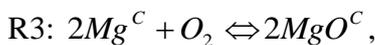
$$\gamma_{Mg} = \gamma_{Mg}^s + \gamma_{Mg}^l = \frac{m_{Mg}}{m_s \mu_{Mg}}; \quad \gamma_{MgO} = \gamma_{MgO}^s + \gamma_{MgO}^l = \frac{m_{MgO}}{m_s \mu_{MgO}}. \quad (10)$$

Значение энтальпии  $H_s$  может быть найдено из (8), а температура частицы  $T_s$  и концентрации  $\gamma_{Mg}^s$ ,  $\gamma_{Mg}^l$ ,  $\gamma_{MgO}^s$ ,  $\gamma_{MgO}^l$  из (9). При фиксированных концентрациях  $\gamma_{Mg}$  и  $\gamma_{MgO}$  энтальпия частицы (9) является монотонно-возрастающей функцией температуры. Для вычисления температуры и концентраций  $\gamma_{Mg}^s$ ,  $\gamma_{Mg}^l$ ,  $\gamma_{MgO}^s$ ,  $\gamma_{MgO}^l$  используется алгоритм, приведенный в [7].

Для описания поверхностных реакций используется кинетический механизм, включающий: реакции испарения (конденсации):



и реакции окисления магния:



индекс “с” относится к твердой и жидкой фазам. Скорости реакций R1-R2 в первом приближении можно найти из соотношений (6). Для нахождения скорости реакции R3 можно использовать диффузионную (11а) и кинетическую (11б) [13, 14] модели. Считается, что скорость притока кислорода к частице магния прямо пропорциональна объемной концентрации кислорода и площади поверхности капли, занятой магнием, значение энергии активации  $E$  заимствовано из [13].

$$\dot{m}_{O_2}^{R3} = -2\pi d \frac{m_{Mg} \rho_S}{\rho_{Mg} m_S} D_i \rho \ln \left( \frac{1 - \gamma_{O_2} \mu_{O_2}}{1 - \gamma_{O_2}^S \mu_{O_2}} \right) \quad (11a)$$

$$\dot{m}_{O_2}^{R3} = -\pi d^2 \frac{m_{Mg} \rho_S}{\rho_{Mg} m_S} K \rho \exp(-E / R_{Mg} T_S) (\gamma_{O_2} - \gamma_{O_2}^S), \quad (11b)$$

Здесь  $E = 4.288$  МДж/кг,  $R_{Mg}$  - газовая постоянная паров магния, равновесная концентрация  $\gamma_{O_2}^S$  находится из условия химического равновесия [5] для реакции R3. Значение константы  $K = 6.1 \cdot 10^{13}$  подбиралось из условия совпадения рассчитанной предельной температуры воспламенения одиночных сферических частиц магния с экспериментальными данными, приведенными в [13] (рис. 1). При проведении расчетов решалась система уравнений (1)-(2) при нормальных условиях и близких к нулю начальными скоростями воздуха и частиц.

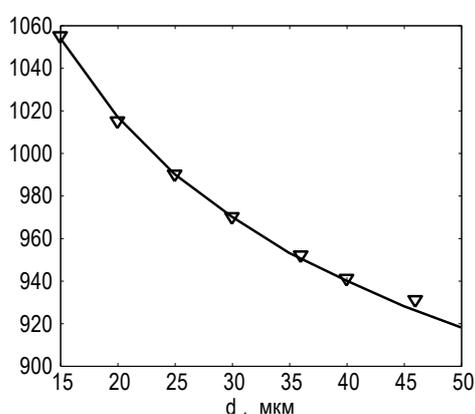


Рис. 1. Сравнение расчетных (сплошная кривая) и экспериментальных данных (маркер), приведенных в [13] предельных температур воспламенения сферических частиц магния разного размера ( $p_0 = 101325$  Па,  $T_0 = 293$  К).

Кинетическая модель (11б) позволяет достаточно точно определить параметры воспламенения частиц магния, однако дает сильно завышенное значение температуры горения [14]. Диффузионная модель (11а), наоборот, не позволяет корректно определять предельную температуру воспламенения, но дает достоверную температуру сгорания частиц при высоких температурах газа [1]. В настоящей работе предлагается в качестве скорости притока кислорода к частице выбрать минимальную из рассчитанных по кинетической и диффузионной моделям – кинетически-диффузионная модель. На рис. 2, 3 приведены результаты расчета испарения капель магния в воздухе для случая пересжатой

детонационной волны в смеси с избытком воздуха. На рис. 2 сравниваются чисто диффузионная модель (кривые 1, 2) и кинетически-диффузионная модель (кривые 3, 4). Диффузионная модель приводит к существенно более быстрому воспламенению частиц, чем кинетически-диффузионная. При этом кривые изменения температуры близки, конечное равновесное состояние – одинаковое. Из рис. 2 видно, что вначале более горячий воздух нагревает частицы и инициирует поверхностную экзотермическую реакцию образования оксида магния ( $R3$ ), протекание которой приводит к нагреву частиц до температуры 3200 К, которая существенно превышает температуру воздуха. При этом происходит плавление магния при температуре 923 К (рис. 2, 3), образование твердого, а при достижении температуры плавления (3100 К) жидкого оксида магния. Далее, так как массовая доля капель небольшая и магний полностью расходуется в процессе поверхностной реакции окисления (рис. 3, кривые 1, 2), происходит остывание капель и выравнивание температур газа и частиц (рис. 2). При этом оксид магния кристаллизуется (рис. 2, 3), к моменту времени  $t = 0.1 \text{ мс}$  капля полностью состоит из твердого оксида магния  $MgO$  (рис. 3).

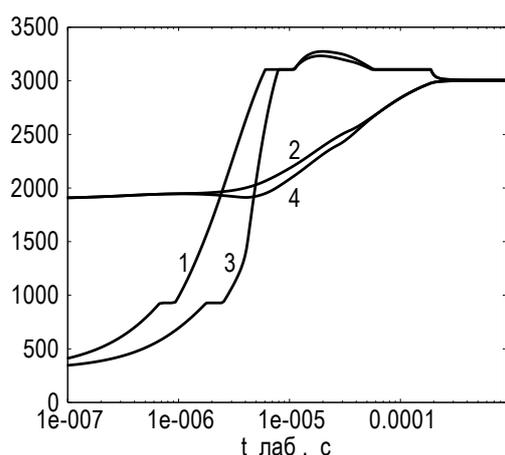


Рис. 2. Зависимость температуры частиц (кривые 1, 3) и газа (кривые 2, 4) от концентраций твердого (кривая 1) и лабораторного времени ( $D = 1950 \text{ м/с}$ ,  $m_{Mg} / m_{Air} = 0.075$ ,  $d_s^0 = 10 \text{ мкм}$ ).

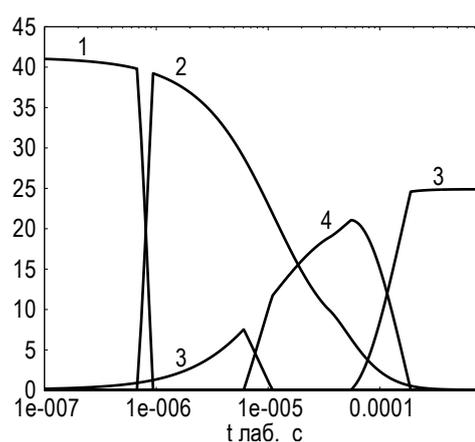


Рис. 3. Зависимость мольномассовых (кривая 1) и жидкого (кривая 2)  $Mg$  и твердого (кривая 3) и жидкого (кривая 4)  $MgO$  внутри частицы от лабораторного времени.

Рассмотрим случай, когда перед- и за- волной горения и детонации частицы металла и газообразные (отмечены индексом "v") и жидкие продукты сгорания находятся в скоростном и температурном равновесии. Если ввести эффективные плотность и внутреннюю энергию:

$$\rho = \rho_v + n_s m_s, \quad e = \frac{\rho_v}{\rho} e_v + \frac{n_s m_s}{\rho} e_s, \quad (12)$$

то справедливы выражения [8, 11] для равновесной детонационной адиабаты ( $V < V_0$ ), для равновесной адиабаты горения ( $V > V_0$ ) [15]:

$$e(T, V, \gamma_i) - e_0 + \frac{1}{2}(p(T, V, \gamma_i) + p_0)(V - V_0) = 0 \quad (13)$$

$$\gamma_i = \gamma_i(T, V, \gamma_K^0)$$

и прямой Релея:

$$p - p_0 - \frac{v_0^2}{V_0^2}(V_0 - V) = 0; \quad (14)$$

Из (13), (14) при известной скорости  $v_0$  могут быть найдены  $V$  и  $T$ , а также  $p$ ,  $\gamma_i$  и  $u$ :

$$u = u_0 \pm \sqrt{(p - p_0)(V_0 - V)}. \quad (15)$$

### Результаты математического моделирования

Изучалась горючая смесь, состоящая из воздуха ( $0.21 O_2 + 0.79 N_2$ ) при стандартном давлении и частиц магния, находящихся при температуре  $T_{s0} = 298.15 K$ , продукты сгорания включали 10 компонент:  $MgO$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $MgO$  (ж),  $Mg$  (ж),  $Mg_3N_2$  (ж),  $O$ ,  $N$ ,  $Mg$ , термодинамические свойства которых заимствовались из [15].

На рис. 4 приведены результаты сравнения параметров равновесной детонации Чепмена-Жуге для смесей, состоящих из частиц магния (кривые 1, 3, 5) и алюминия (кривые 2, 4, 6 [7]) и воздуха при нормальных условиях ( $p_0 = 101325 Pa$ ,  $T_0 = 298.15 K$ ). Пиковые значения скорости детонации и температуры при сгорании частиц алюминия выше чем у магния (кривые 1-4), при этом, при большом массовом содержании металла скорость детонации выше в смеси магния с воздухом (кривые 1, 2). В продуктах сгорания магния (рис. 5) присутствуют в виде мелких частиц оксид магния, а при  $m_{Mg} / m_{Air} > 1.35$  нитрид магния.

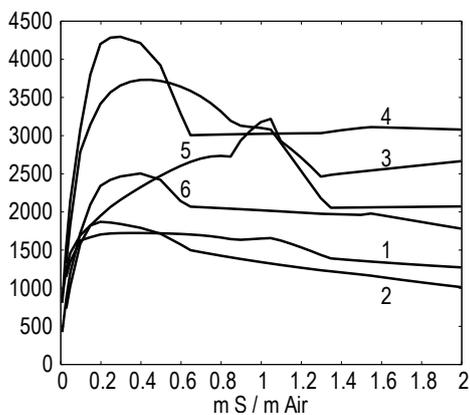


Рис. 4. Зависимость скорости детонации

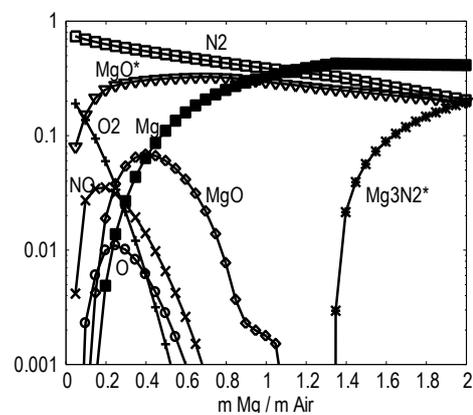


Рис. 5. Зависимость массовых долей

Чепмена-Жуге (1, 2), температуры (3, 4), компонент в точке Чепмена-Жуге от давления (5, 6) от отношения массы частиц отношения массы магния к массе воздуха к массе воздуха (1, 3, 5 –  $Mg$ ; 2, 4, 6 –  $Al$ ). ( $MgO^*$ ,  $Mg_3N_2^*$  - в жидком состоянии).

На рис. 6 приведены результаты расчета параметров равновесной волны горения для смеси, состоящих из частиц магния и воздуха при повышенной температуре, и скоростном равновесии фаз в начальный момент времени. Максимальная скорость воздуха (кривая 1) при которой существовало решение, изменялась от 245 м/с при  $m_{Mg} / m_{Air} = 0.05$ , до 80 м/с при  $m_{Mg} / m_{Air} = 2$ , давление по сравнению с начальным уменьшалось примерно в 2 раза (кривая 3), график температуры содержал пологий максимум при  $m_{Mg} / m_{Air} = 0.2 - 0.8$ , точка излома на графиках соответствует началу образования в продуктах сгорания нитрида магния (рис. 7).

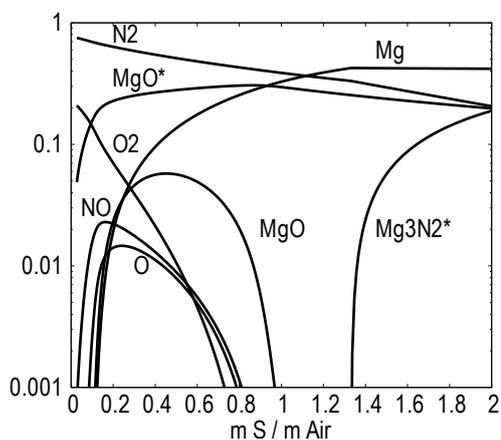
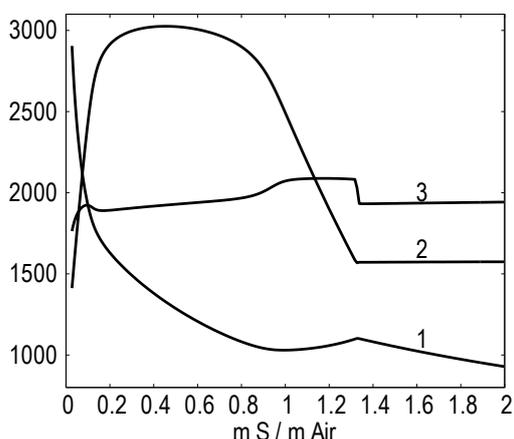


Рис. 6. Зависимость максимальной скорости горения (1), температуры (2), давления (3) от отношения массы частиц  $Mg$  к массе воздуха ( $p_0 = 101325 \text{ Па}$ ,  $T_0 = 1000 \text{ К}$ ).

Рис.7. Зависимость массовых долей компонент от отношения массы магния к массе воздуха ( $MgO^*$ ,  $Mg_3N_2^*$  - в жидком состоянии).

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена-Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Решалась система дифференциально-алгебраических уравнений (1) - (2) с соответствующими замыкающими соотношениями. Скорость детонации Чепмена-Жуге определялась как минимальная, при которой данная система имеет решение. Рассматривались частицы магния с начальным диаметром 10 мкм, учитывались процессы испарения и плавления  $Mg$  и  $MgO$ , и реакция на поверхности частиц:  $2Mg(ж) + O_2 = 2MgO(ж)$ , в газовой фазе считалось, что химические реакции протекают равновесно, при этом учитывалась возможность образования мелкодисперсных  $MgO(ж)$ ,  $Mg(ж)$ ,  $Mg_3N_2(ж)$ .

На рис. 8 приведены графики изменения параметров продуктов сгорания в детонационной волне Чепмена-Жуге при различных соотношениях магний - воздух. Расчеты проводились до достижения состояния термодинамического равновесия. При соотношении компонент далеко от стехиометрии (кривые 1, 3, 4 рис. 8) температура частиц (рис. 8а) в процессе горения существенно превышает температуру газа, зависимости изменения диаметра частицы от времени (рис. 8б) содержат точку минимума, связанную с процессом конденсации оксида магния на частице, концентрация мелкодисперсного окисла в газе, соответственно, уменьшается (рис. 8в). При соотношении компонент близком к стехиометрическому (кривая 1, рис. 8), частица прогревается до температуры, превышающей температуру плавления оксида магния. Диаметр частицы монотонно уменьшается (рис. 8б), в состоянии равновесия, при этом, в значительных концентрациях содержится мелкодисперсный оксид магния (рис. 8в). Время окончания горения частицы приблизительно может быть определено по моменту времени соответствующему прекращению изменения концентрации кислорода (рис. 8д).

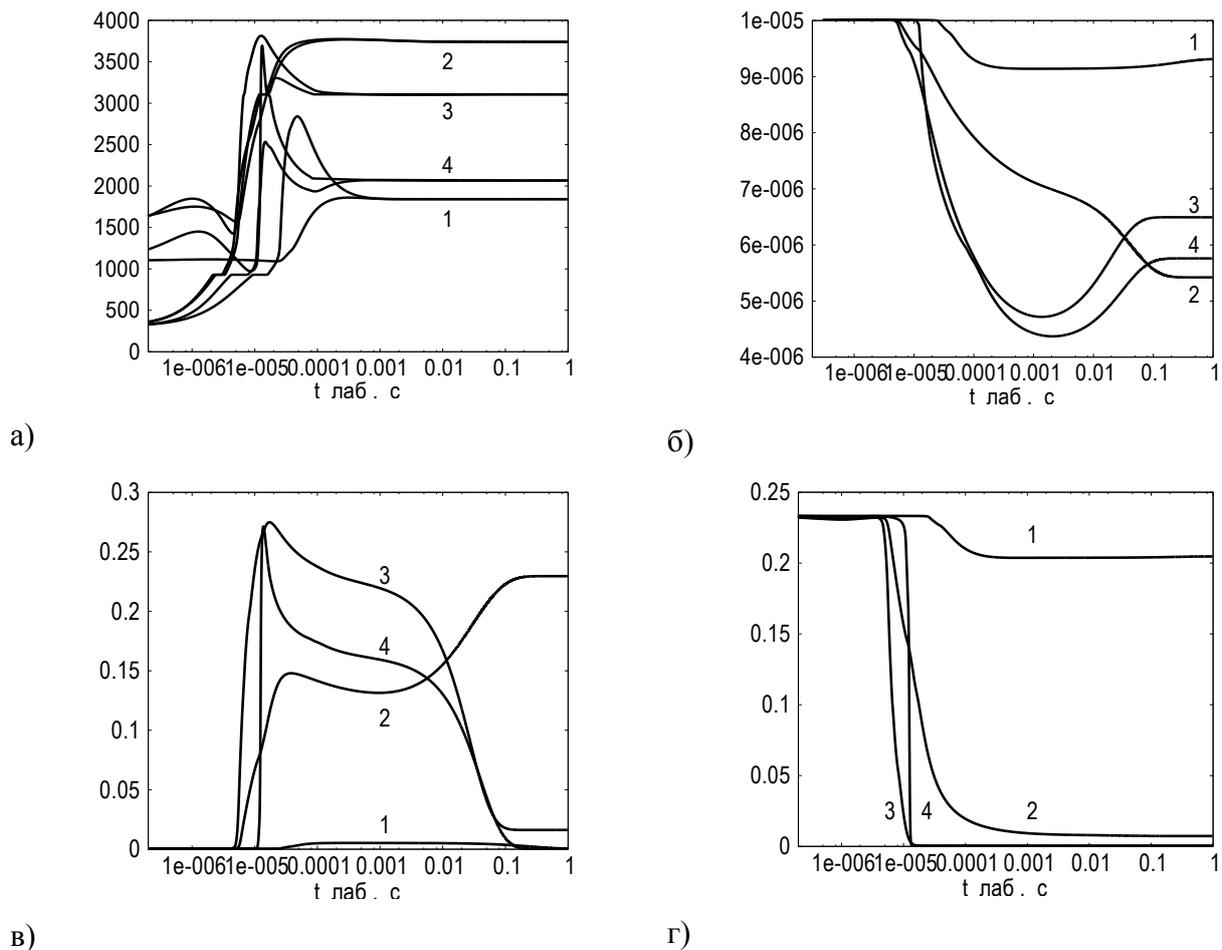
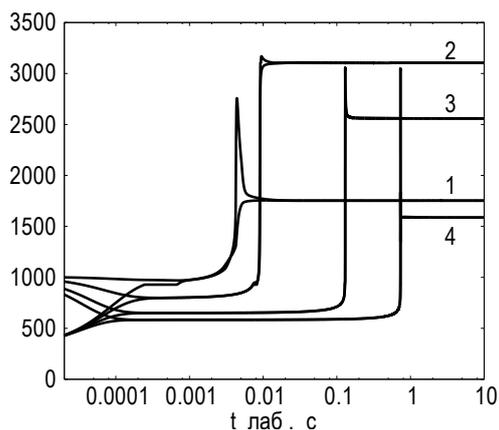


Рис. 8. Зависимость температуры (а), диаметра частиц (б), массовой доли мелкодисперсного окисла (в), концентрации кислорода (г) в детонационной волне от

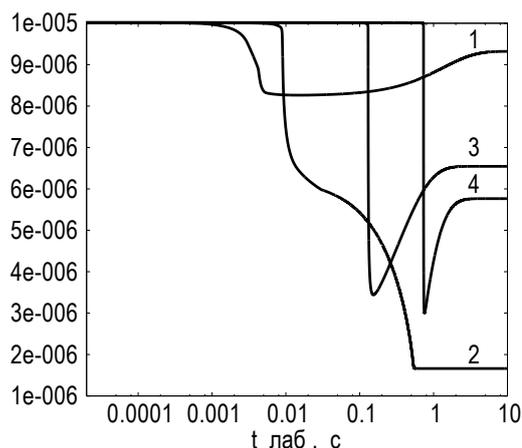
лабораторного времени.  $m_{Mg}/m_{Air} = \{ 0.05 - \text{кривая 1}, 0.40 - 2, 1.0 - 3, 1.5 - 4 \}$ .

Также было проведено численное моделирование течения в стационарной волне горения при заданных в начальном сечении равенстве скоростей газа и частиц и температуре воздуха -  $T_0 = 1000 K$  при различных массовых содержаниях частиц магния в воздухе (рис. 9). Необходимо отметить, что начальная температура воздуха сильно влияет на время задержки воспламенения и очень слабо на конечное равновесное состояние. Графики функций параметров течения содержат более резкие максимумы (рис. 9а – 9д) чем при моделировании детонации (рис. 8а – 8д). В целом качественное поведение процесса не меняется.

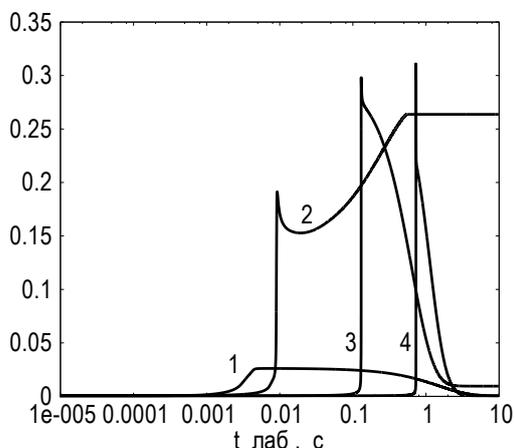
Необходимо отметить, что при моделировании волн детонации (рис. 8) и горения (рис. 9) суммарные концентрации оксида магния в частицах и мелкодисперсном окисле при переходе системы в равновесное состояние соответствуют концентрации  $MgO^*$ , полученным при расчете равновесной адиабаты рис. 5, 7.



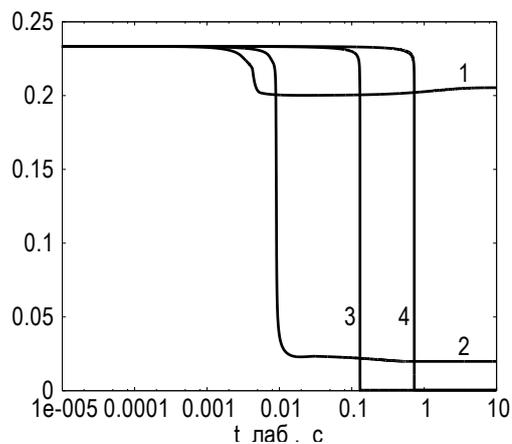
а)



б)



в)



г)

Рис. 9. Зависимость температуры (а), диаметра частиц (б), массовой доли мелкодисперсного окисла (в), концентрации кислорода (г) в волне горения от лабораторного времени.  $m_{Mg} / m_{Air} = \{ 0.05 - \text{кривая 1}, 0.40 - 2, 1.0 - 3, 1.5 - 4 \}$ .

На рис. 10 приведены различные режимы нагрева частицы магния высокотемпературным потоком воздуха, соответствующие результатам исследований, приведенным в [17]. Первый режим (кривая 1) соответствует нагреву частицы без воспламенения до температуры воздуха, второй режим (кривые 2) соответствует воспламенению с погасанием [17] – температура частицы достигает температуры плавления магния, частица плавится (горизонтальный участок на кривой), затем нагрев продолжается, температура частицы на 200 К, превышает температуру воздуха, но энергии химических реакций недостаточно для воспламенения и частица остывает, третий режим (кривые 3, 4) соответствует воспламенению частиц, температура частицы магния достигает и даже превосходит (кривая 4) температуру плавления окисной пленки магния. По окончании горения температуры частицы и воздуха становятся одинаковыми. В рассмотренном варианте смена режимов горения частицы происходит при температурах воздуха 850 К и 1016 К, соответственно.

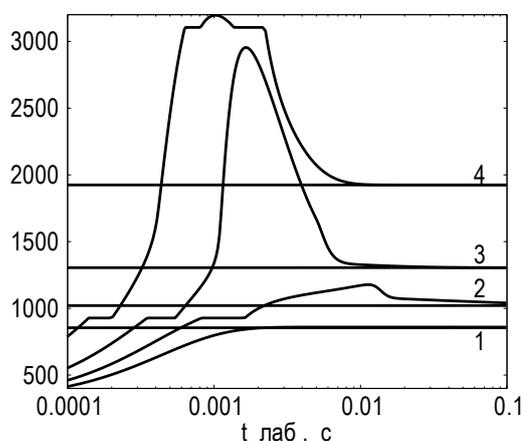


Рис. 10. Различные режимы воспламенения одиночной сферической частицы магния.

1 -  $T_0 = 850 \text{ K}$ , 2 -  $T_0 = 1016 \text{ K}$ , 3 -  $T_0 = 1300 \text{ K}$ , 4 -  $T_0 = 1920 \text{ K}$  ( $p_0 = 101325 \text{ Па}$ ,  $d_s^0 = 20 \text{ мкм}$ ,  $T_{s0} = 298.15 \text{ K}$ ).

## Выводы

Разработаны физико-математическая модель, вычислительные алгоритмы и комплекс программ для расчета стационарных волн воспламенения и детонации в горючей смеси частиц магния с воздухом, которые могут быть использованы при моделировании многомерных течений.

Проведено численное моделирование стационарных волн горения и детонации в стандартных условиях при отношении начальных масс магния и воздуха в диапазоне от 0.03 до 2. Расчетным путем получена структура стационарных волн горения и детонации,

включающая нагрев, плавление, испарение, воспламенение и изменение состава частиц и соответствующее изменение температуры и состава газофазных продуктов сгорания, образование мелкодисперсных частиц магния, оксида магния и нитрида магния. Исследовано влияние массовой доли магния на минимальную скорость стационарной детонации и максимальную скорость стационарной волны горения.

Показано, что разработанная модель воспроизводит три режима нагрева частиц магния [17]: без воспламенения частиц; воспламенение с погасанием; воспламенение.

Расчетным путем получено, что параметры стационарных волн горения и детонации асимптотически стремятся к равновесным значениям – точке на равновесной адиабате.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (11-08-01066-а).

### Библиографический список

1. Похил П.Ф., Беляев А.Ф., Фролов Ю.В., Логачев В.С., Коротков А.И. Горение порошкообразных металлов в активных средах — М.: «Наука», 1972. — 294 с.
2. Митрофанов В.В. Детонация гомогенных и гетерогенных систем.- Новосибирск: Изд-во Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2003, 200 с.
3. Медведев А.Е., Федоров А.В., Фомин В.М. Описание горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды//ФГВ, 1984, т. 20, №2, с. 3-9.
4. Гремячкин В.М., Истратов А.Г., Лейпунский О.И. Модель горения мелких капель металла // ФГВ. 1975. Т. 11. № 3. С. 366.
5. Дрегалин А.Ф., Зенуков И.А., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергоустановках/ Под ред. В.Е. Алемасова. Изд-во Казанского университета, 1985 , 263 с
6. Федоров А.В., Фомин В.М., Хмель Т.А. Гетерогенная детонация// В кн. Законы горения/Под ред. Ю.В.Полежаева. М.: Энергомаш, 2006, с. 276-302.
7. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование стационарных детонационных волн в смеси частиц алюминия с воздухом. Электронный журнал “Труды МАИ”, 2011, № 49 , 18 с.
8. У.Г.Пирумов. Математическое моделирование в проблемах охраны воздушного бассейна.- М.: Изд-во МАИ, 2001.-340 с. ил.
9. Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Стрельцов В.Ю. Численное моделирование течений реагирующих газочапельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола // ТВТ. 1998. Т. 36. № 3. С. 424-434.

10. В.Ю.Гидаспов, О.А.Москаленко, У.Г.Пирумов. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 2, 2009, с. 51-61.
11. В.В.Лунев. Течение реальных газов с большими скоростями. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 760 с.
12. А.А.Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М: Наука, 1967.
13. К.А.Авдеев, Ф.С.Фролов, А.А.Басевич, С.М.Фролов. Модифицированная модель воспламенения частицы магния//Химическая физика, 2008, т. 27, № 6, с. 47-53.
14. В.Н.Попов, А.В.Федоров, А.В.Шульгин. Численное моделирование воспламенения частицы магния в неоднородном тепловом поле//Математическое моделирование, 2007, т. 19, н. 6, стр. 109- 117.
15. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. Изд-во АН СССР, 1944.
16. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т.// Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. – М.: Наука, 1982.
17. А.В.Федоров, Д.А.Тропин. Математическая модель воспламенения магния в расширенном диапазоне параметров//Физика горения и взрыва, 2008, т. 44, № 5. стр. 64-71.