

# РАЗЛИЧНЫЕ РЕЖИМЫ СГОРАНИЯ ОБЛАКОВ МЕЛКИХ РЕАКЦИОННОСПОСОБНЫХ ЧАСТИЦ В АТМОСФЕРЕ

А.В. Федоров, В.М. Фомин, Т.А. Хмель

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Новосибирск, Россия

## **Введение**

Среди множества космических объектов, представляющих угрозу существования жизни на планете, могут встречаться газопылевые облака с мелкими частицами вещества, способного вступать в химические реакции в присутствии окислителя. При вхождении в верхние слои атмосферы в смесях такого рода возможно образование фронтов горения и детонации, вызванное различными внешними причинами. После прохождения детонационной волны конденсированная фаза может выгореть до частиц существенно меньшего размера или даже полностью перейти в газовую. В целях предотвращения разрушающего действия пылевых облаков и снижения опасности их загрязняющего, в том числе радиационного, влияния детонационные процессы могут осуществляться целенаправленно. В связи с этим, представляют интерес проблемы существования самоподдерживающихся детонационных волн (ДВ) в аэрозвесах. Настоящая работа посвящена теоретическому и численному исследованию процессов распространения самоподдерживающихся ДВ в рамках модели аэрозвеси алюминиевой пыли в кислороде.

Математическая модель детонации частиц алюминия в кислороде была предложена в [1, 2]. Стационарные режимы детонации и вопросы их устойчивости в рамках односкоростной двухтемпературной модели исследовались в [3, 4]. В [4] было установлено, что при неполном выгорании частиц стационарные режимы Чепмена–Жуге (ЧЖ) существуют в ограниченном диапазоне изменения параметра релаксации (отношения характерных времен тепловой релаксации и горения). При скорости детонации выше скорости ЧЖ кроме пересжатых волн возможны недосжатые, конечное состояние которых является сверхзвуковым по равновесной скорости звука или (при наличии в зоне горения перехода через замороженную скорость звука) по замороженной. Недосжатые режимы реализуются на некотором многообразии в пространстве параметров: скорость ДВ, отношение параметров релаксации. Все стационарные режимы устойчивы относительно конечных плоских возмущений при условии поддержки поршнем [4]. В свободной детонации самоподдерживающиеся режимы можно выявить, рассмотрев задачу взаимодействия ДВ с примыкающей волной разрежения (ВР). Интересно изучить результат взаимодействия пересжатой ДВ и ВР в области значений параметров, где режим Чепмена–Жуге не существует. Кроме того, актуально обобщение результатов [3,4] на случай частиц более крупного размера, когда необходимо учитывать конечность сил взаимодействия Стокса и пользоваться двухскоростной двухтемпературной моделью.

## **Постановка задачи о взаимодействии ДВ и ВР**

Рассматривается пространство, заполненное смесью мелких частиц алюминия и кислорода. До какого-то момента времени по смеси распространяется стационарная ДВ, поддерживаемая поршнем в соответствии с одним из режимов [3]. Затем поршень мгновенно убирается, и в зоне равновесия формируется центрированная волна разрежения. Процесс распространения детонационной волны с примыкающей ВР и их взаимодействие в различных детонационных режимах будут исследованы численно.

Уравнения, описывающие одномерное нестационарное течение смеси газа и мелких частиц алюминия, в односкоростном двухтемпературном приближении имеют вид [2, 4]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho \left( u^2 + \frac{P}{\rho} \right)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \left( E + \frac{P}{\rho} \right)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_2}{\partial t} + u \frac{\partial T_2}{\partial x} = -\frac{1}{\tau_T} (T_2 - T),$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + u \frac{\partial \xi}{\partial x} = -\frac{1}{\tau_\xi} (\xi - \xi_K) \exp \left( -\frac{E_A}{RT_2} \right) \max \left( 0, \text{sign} (T_2 - T_{\text{ign}}) \right),$$

$$P = (1 - \xi) \rho R T, \quad e = (1 - \xi) c_{v1} T + \xi c_{v2} T_2 + Q \xi, \quad E = e + \frac{u^2}{2}.$$

Здесь  $\xi$  — относительная массовая концентрация частиц,  $\xi_K$  — доля несгоревших частиц,  $T$ ,  $T_2$  — температуры газа и частиц соответственно,  $T_{\text{ign}}$  — температура воспламенения частиц,  $\tau_T, \tau_\xi$  — характерные времена тепловой релаксации и горения,  $c_{v1}, c_{v2}$  — теплоемкости газа и частиц,  $E_A$  — энергия активации,  $Q$  — скорость тепловыделения химической реакции. Остальные обозначения общеприняты. Индекс  $K$  указывает на конечное состояние смеси после прохождения ДВ.

В принятых предположениях задачу Коши для решения системы (1) можно поставить следующим образом:  $\Phi = \{\rho, u, \xi, T, T_2\}$   $\Phi|_{t=0} = \Phi_0(x)$ , где  $\Phi_0(x)$  складывается из невозмущенного состояния перед фронтом и полученного численно в [4] профиля за фронтом, стационарной ДВ при  $x_K < x < x_D$ , а также центрированной волны разрежения при  $0 < x < x_K$ , параметры которой определяются в предположении теплового равновесия с учетом  $P(0) = P_0$ . Численный метод включает в себя применение схемы класса TVD, адаптированной к исследованию реальных газов, и программного комплекса GEAR для решения уравнений кинетики. Подробное описание метода имеется в [4].

## Анализ результатов расчетов

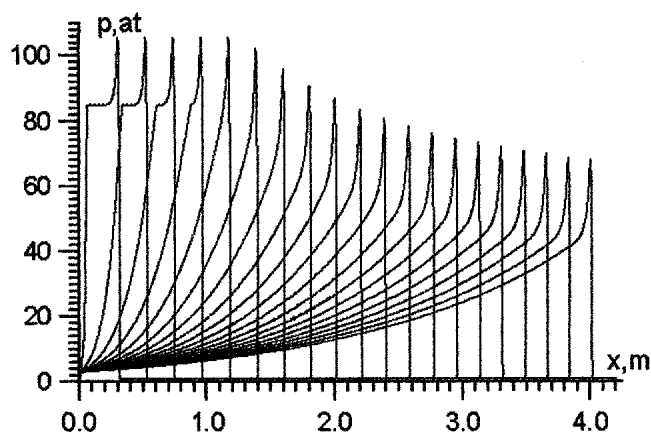
Для параметров, отвечающих нормальному режиму детонации ЧЖ, взаимодействия ДВ и ВР не происходит. Скорость фронта и амплитуда замороженной ударной волны (ЗУВ) сохраняют постоянные значения, расстояние от фронта до точки сопряжения равновесной зоны с волной разрежения не меняется.

Взаимодействие ДВ и ВР в пересжатом режиме в докритической области параметра релаксации  $\beta = \frac{\tau_T}{\tau_\xi}$ , при которых режим ЧЖ существует, приводит к ослаблению ДВ и переходу ее

в волну ЧЖ. Характерная картина течения представлена на рис. 1 в виде распределения давления с временным интервалом 0,1 мс. (Начальная скорость ДВ  $u_0 = 2159$  м/с, релаксационный параметр  $\beta = 50$ .) Здесь на первом этапе волна разрежения догоняет фронт ДВ, скорость которого сохраняется, но зона равновесного конечного состояния сокращается. По мере прохождения веера характеристик ВР через зону химической реакции, амплитуда ДВ уменьшается, скорость фронта падает, происходит переформирование течения за фронтом. Затем скорость и амплитуда ДВ выходят на постоянное значение, соответствующее нормальному режиму ЧЖ (скорость 1548 м/с). Таким образом, результатом взаимодействия ДВ и ВР в пересжатом режиме при  $\beta \leq \beta_m \sim 10$  является формирование волны Чепмена–Жуге и ее распространение в самоподдерживающемся режиме.

Рис. 1.

Стационарное решение типа недосжатой детонации анализировалось для модельной смеси с



более выраженной дисперсией скорости звука конечного состояния. (Частицы предполагаются обладающими в несколько раз большей теплоемкостью, чем алюминий, а также большей остаточной концентрацией, свойства газа не меняются). Здесь оказалось, что передняя характеристика ВР и точка сопряжения ВР с равновесной зоной отстает от фронта ЗУВ, протяженность равновесной зоны увеличивается. При этом, амплитуда ЗУВ и скорость фронта остаются постоянными. Таким образом, подтверждается представление, что режим недосжатой детонации, также как и режим ЧЖ, является самоподдерживающимся.

Развитие взаимодействия пересжатой детонационной волны с волной разрежения при  $\beta > \beta_m$ , где нет стационарных решений ЧЖ, исследовалось на примере вышеуказанного модельного вещества. Рассмотрим случай, когда конечное состояние недосжатой детонации является сверхзвуковым как по равновесной, так и по замороженной скорости звука  $\beta > \beta_* > \beta_m$ . Результаты расчетов представлены на рис. 2 (первая стадия взаимодействия с временным шагом 0,8 мс) и рис. 3 (вторая стадия с шагом 1,6 мс). Из сравнения с рис. 1 видно, что структура течения за фронтом здесь является более сложной, чем в пересжатых режимах при  $\beta < \beta_m$ . В зоне горения имеется точка возврата (минимум давления), за которой течение посредством волны сжатия выходит на конечное равновесное состояние. На первом этапе происходит сокращение равновесной зоны и плавное смыкание ВР с волной сжатия. Затем состояние в точке смыкания меняется (давление уменьшается), но состояние в точке возврата сохраняется. С некоторого момента (примерно 2,6 мс) начинается падение давления и в точке возврата. В результате опрокидывания волны сжатия за точкой возврата на некоторое время возникает ударный скачок (на рис. 3 заметен скачок давления). Здесь выполняются условия на ДВ для всех параметров и имеет место скачкообразный рост температуры газа, тогда как температура частиц меняется плавно. По мере взаимодействия с веером ВР возникшая ударная волна ослабляется и исчезает. Сформированное в точке возврата состояние является сверхзвуковым по замороженной скорости звука. примыкающая к этому состоянию волна сжатия и следующая за ней волна разрежения начинают отставать. Сформированный за ЗУВ профиль соответствует стационарному недосжатому режиму, который распространяется с минимально возможной для данного  $\beta$  скоростью.

В интервале  $\beta < \beta_* \leq \beta_m$  конечные состояния слабой детонации являются сверхзвуковыми по равновесной, но дозвуковыми по замороженной скорости звука, а конечная точка является седлом [4]. Данный “структурно-неустойчивый” недосжатый режим устойчив относительно плоских конечных возмущений при поддерживающем воздействии поршня [4]. Результаты расчетов взаимодействия ДВ и ВР при снятии поршня для модельной смеси в этом интервале  $\beta$  показаны на рис. 4. Здесь ослабление ДВ в результате взаимодействия с ВР приводит к ее распаду на ударный скачок и фронт горения. Амплитуда ударной волны уменьшается, скорость падает, при этом зона задержки воспламенения увеличивается, и фронт горения отстает. Такая структура устойчива, пока отношение расстояния от фронта горения до фронта ЗУВ к ширине зоны релаксации не превысит некоторого критического значения [5]. Затем развивается неустойчивость, что проявляется в численных расчетах в появлении и катастрофическом росте осцилляций. Для пересжатой детонации в этом же интервале  $\beta$  результат аналогичен. После периода ослабления ДВ и перестройки течения также происходит разделение ДВ на ударную волну и отстающий фронт горения с последующей

потерей устойчивости. Попытка учесть влияние диффузионных процессов путем введения искусственных диссипативных членов не привела к решениям типа “галопирующей детонации” [6], (полученных в [6], заметим, для существенно отличного закона горения), или другим каким-либо регулярным нестационарным решениям.

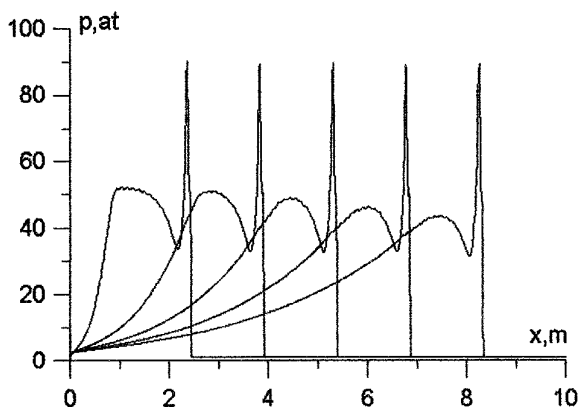


Рис. 2.

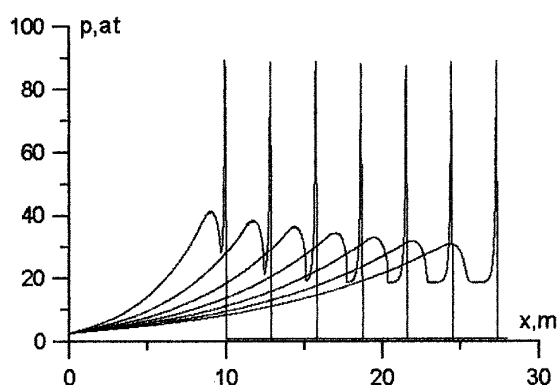


Рис. 3.

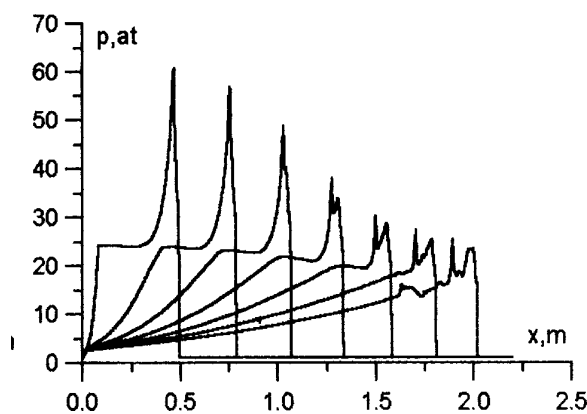


Рис. 4.

Проведенные исследования дают основания полагать, что в рассмотренной постановке в “дисперсионном” интервале параметра релаксации  $\beta$  стационарных режимов свободной детонации не существует.

### ***Двухскоростная двухтемпературная модель детонации***

Выше предполагалось, что частицы малы, и происходит их практически мгновенное увлечение потоком газа. Это позволяло пользоваться односкоростной моделью. Для более крупных частиц учет конечности сил Стокса может привести к существенным отличиям как в структуре течения за фронтом ДВ, так и в определении границ существования самоподдерживающихся стационарных режимов детонации.

Рассматривается стационарная задача распространения ДВ с постоянной скоростью в двухскоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред. Уравнения движения можно представить в виде трех законов сохранения для смеси в целом и трех дифференциальных уравнений для плотности, скорости и температуры одной из фаз. Закон горения и уравнение тепловой релаксации примем в соответствии с (1),  $\tau_u$  — характерное время стоковского взаимодействия.

$$\rho_1 u_1 + \rho_2 u_2 = c_1, \quad \rho_1 u_1^2 + \rho_2 u_2^2 = c_2, \quad \rho_1 u_1 E_1 + \rho_2 u_2 E_2 = c_3,$$

$$\frac{d(\rho_2 u_2)}{dx} = \frac{1}{\tau_\xi} \rho(\xi - \xi_K) \exp(-E_A / RT_2) \max(0, \text{sign}(T_2 - T_{\text{ign}})), \quad (3)$$

$$u_2 \frac{du_2}{dx} = \frac{1}{\tau_u} (u_1 - u_2), \quad u_2 \frac{dT_2}{dx} = \frac{1}{\tau_T} (T - T_2), \quad \rho_2 = \rho \xi,$$

$$P = \rho_1 RT, \quad E_1 = \frac{u_1^2}{2} + c_{v1} T, \quad E_2 = \frac{u_2^2}{2} + c_{v2} T_2 + Q.$$

Задача характеризуется четырьмя величинами скорости звука: полностью замороженная (по скоростям и концентрациям), равная скорости распространения малых возмущений в среде  $c_f^2 = \frac{\gamma_1 P}{\rho_1} = \gamma_1 RT$ ; замороженно-равновесная (замороженная по концентрациям и равновесная по скоростям), равная замороженной скорости звука в односкоростной модели  $c_{fe}^2 = \frac{\gamma_1 P}{\rho} = \gamma_1(1 - \xi)RT$ ; равновесно-замороженная (равновесная по концентрациям и замороженная по скоростям)  $c_{ef}^2 = \frac{\gamma P}{\rho_1} = \gamma RT$ , где  $\gamma = 1 + \frac{R(1 - \xi)}{c_v(\xi)}$ ,  $c_v(\xi) = c_{v1}(1 - \xi) + c_{v2}\xi$ ; равновесная (по скоростям и концентрациям)  $c_e^2 = \frac{\gamma P}{\rho} = \gamma(1 - \xi)RT$ . Справедливо  $c_f > c_{fe} > c_e$ ,  $c_f > c_{ef} > c_e$ .

В режиме ЧЖ конечная скорость смеси равна равновесной скорости звука.

### Конечная особая точка

Исследуем тип особенности конечного стационарного состояния (3). Для удобства введем  $\phi_2 = \rho_2 u_2$ ,  $\phi_1 = \rho_1 u_1$  и  $dx = \tau_T u_2 dy$ . Анализируемая система ОДУ имеет вид

$$\frac{d\phi_2}{dy} = -\beta \phi_2 (1 - \xi_K) + \frac{\beta \phi_1 \xi_K u_2}{u_1},$$

$$\frac{du_2}{dy} = \alpha(u_1 - u_2), \quad \frac{dT_2}{dy} = T - T_2, \quad (4)$$

где  $\phi_1(\phi_2, u_2, T_2)$ ,  $T(\phi_1, u_2, T_2)$  алгебраически выражаются из (3).

Собственные числа матрицы Якоби правой части (4) при  $\xi = \xi_K$ ,  $u_1 = u_2$ ,  $T = T_2$ , суть корни характеристического уравнения  $\lambda^3 + a_1 \lambda^2 + a_2 \lambda + a_3 = 0$ , где  $a_1, a_2, a_3$  определяются через  $\beta$ ,  $\alpha = \frac{\tau_T}{\tau_u}$

и константы, зависящие от начального состояния и скорости ДВ. Предельный случай  $\tau_u = 0$  ( $\alpha = \infty$ ) соответствует односкоростному приближению. Уравнение при этом вырождается в квадратное, корни которого совпадают с собственными числами, полученными в [3, 4]. В общем случае имеется три корня, один из которых всегда действительный. Численно определим типы особых точек, в зависимости от релаксационных параметров, в различных режимах детонации:

- в режиме ЧЖ,  $u_K = c_e$ , одно из собственных чисел равно нулю, а в зависимости от знаков вещественной части других корней конечная точка может быть неустойчивой (седло или узел-фокус) или устойчивой (узел или узел-фокус). Карта особых точек в плоскости  $(\alpha, \beta)$  показана на рис. 5. На прямой, отделяющей устойчивые и неустойчивые точки в области комплексных значений корней, лежат точки типа центр;

- в пересжатых режимах,  $u_K < c_e$ , одно из собственных чисел вещественно и отрицательно, а в зависимости от двух других конечная точка может быть неустойчивой (седло или седло–фокус) или устойчивой (узел или узел–фокус). При скорости детонации, близкой к скорости ЧЖ, картина похожа на рис. 5. С увеличением скорости ДВ область неустойчивости резко сокращается и исчезает;
- в недосжатых режимах конечная скорость больше равновесной скорости звука. При изменении скорости ДВ от скорости ЧЖ до некоторой критической, конечное состояние остается дозвуковым по замороженной (“дисперсионный” интервал). Здесь одно из собственных чисел положительно и конечное состояние неустойчиво (седло, седло–фокус). В односкоростной модели стационарное решение такого типа, устойчивое при поддержке поршнем, оказалось неустойчивым в свободной детонации (рис. 4);
- в недосжатых режимах вне “дисперсионного” интервала конечная скорость больше замороженной скорости звука. Здесь конечные точки устойчивы во всей плоскости (узел или узел–фокус) (рис. 6).

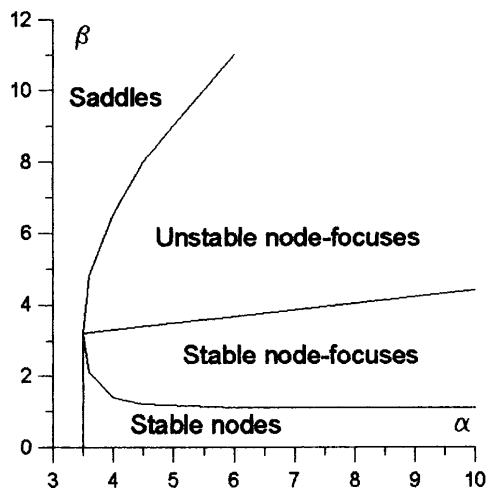


Рис. 5

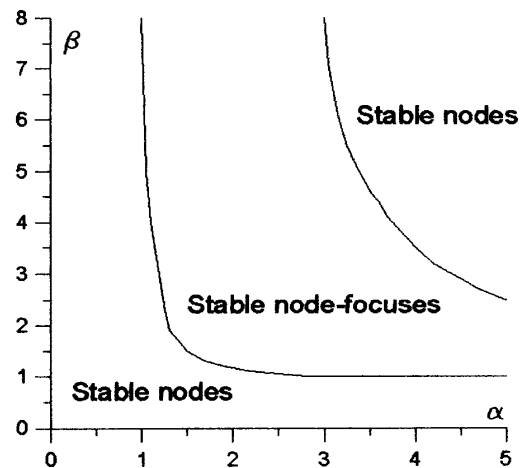


Рис. 6

В [3, 4] установлено, что не все конечные состояния являются достижимыми, и получена кривая  $M_0 = \tilde{M}(\beta)$ , отделяющая область существования стационарных решений от области нестационарности в плоскости  $(M_0, \beta)$ , ( $M_0$  — число Маха скорости ДВ). В двухскоростной математической модели присутствует дополнительный параметр  $\alpha = \frac{\tau_T}{\tau_u}$ , в силу чего область стационарности отделяется в пространстве  $(M_0, \alpha, \beta)$  поверхностью  $M_0 = \tilde{M}(\alpha, \beta)$ . Ниже поверхности при  $M_0 < \tilde{M}(\alpha, \beta)$  стационарных решений не существует. Выше стационарные решения отвечают режиму пересжатой детонации. На поверхности реализуются режимы с внутренней особой точкой (пересжатые и недосжатые). Разделяющая поверхность имеет сложный вид и представлена на рис. 7 и 8 линиями уровня при различных  $M_0$ . При  $M_0 = M_{CJ}$  стационарные решения ЧЖ существуют в области  $\beta < \beta_{CJ}(\alpha)$ . Кривая  $\beta_{CJ}(\alpha)$  имеет асимптоту  $\beta \rightarrow \beta_m, \alpha \rightarrow \infty$ . Область нестационарности при данном  $M_0$  ограничена указанной кривой и осью  $\alpha$ . Начиная с некоторого  $M_0 > M_{CJ}$  линии уровня разделяются на две кривые, выходящие из точки  $(0, 0)$ . Верхняя кривая асимптотически уходит на бесконечность  $\beta \rightarrow \tilde{\beta}(M_0), \alpha \rightarrow \infty$ , нижняя заканчивается на оси  $\alpha$ . С дальнейшим увеличением скорости детонации линии уровня отрываются от точки  $(0, 0)$ , и область нестационарности ограничивается кривой, смещающейся в сторону увеличения  $\alpha$  и  $\beta$ . Начиная с некоторого  $M_0 \geq M_{**}$  стационарные решения (пересжатые режимы) существуют во всей плоскости релаксационных параметров.

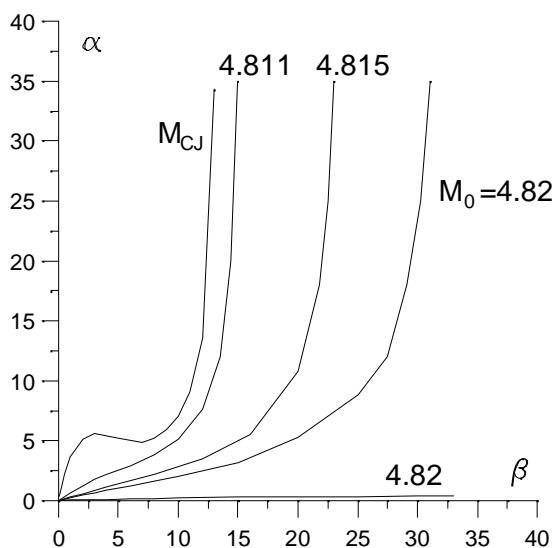


Рис. 7

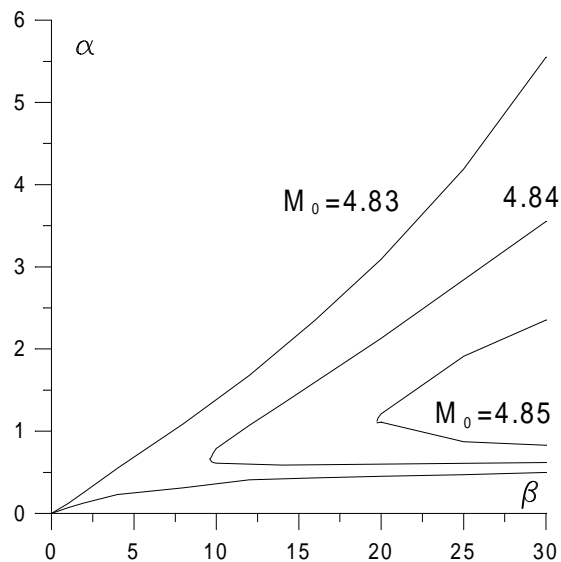


Рис. 8

Внутри области существования решений конечные особые точки оказались всегда устойчивыми. На разделяющей поверхности режимы Чепмена–Жуге и пересжатые устойчивы всегда, а недосжатые устойчивы при  $M_0 > M_* > M_{CJ}$ .

Численные иллюстрации некоторых стационарных режимов детонации для аэровзвеси частиц алюминия в кислороде в двухскоростной двухтемпературной постановке представлены на рис. 9–12. На рис. 9 показано распределение давлений и плотностей газа и частиц в режиме ЧЖ при  $\alpha = 5$  и  $\beta = 7$ . Характерным здесь является резкий рост плотности частиц в некотором тонком слое за фронтом ДВ.

На рис. 10 показано поведение скоростей газа и частиц в пересжатом режиме с внутренней особой точкой при  $M_0 = 4,83$ ,  $\alpha = 1,6822$ ,  $\beta = 12$ . Здесь же нанесено распределение относительной массовой концентрации частиц. Видно, что в зоне горения скорости газа и частиц отличаются существенно. Сложное поведение температуры газа на рис. 11 для этих же параметров обусловлено влиянием сил Стокса при взаимодействии процессов горения и тепловой релаксации частиц. Локальный минимум температуры газа, коррелирующий с резким изломом скорости при  $x = 0,24$ , связан с прохождением внутренней особой точки. На рис. 12 показано распределение скоростей в недосжатом режиме для  $\alpha = 0,4254$  и  $\beta = 16$  при  $M_0 = 4,83$  (нижняя линия уровня на рис. 8). Здесь решение проходит через внутреннюю особую точку  $M_0 = 1$  при  $x = 0,78$  м и выходит в сверхзвуковое конечное состояние. Скорости газа и частиц выравниваются при  $x = 2$  м, зона тепловой релаксации и горения составляет 0,6 м.

Оценки вклада в энергетические характеристики среды процессов горения, тепловой релаксации и работы сил Стокса показали, что вообще говоря, ни одним из перечисленных факторов в исследовании детонации аэровзвесей частиц пренебрегать нельзя.

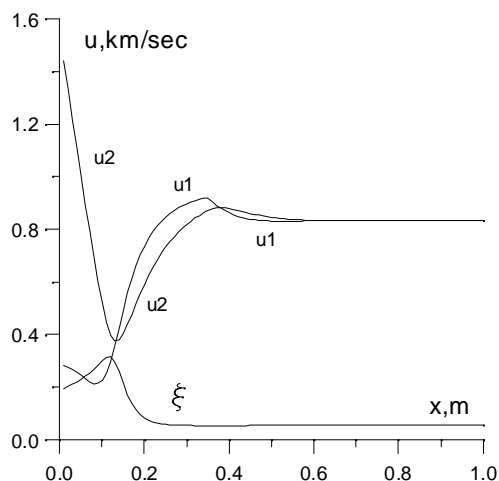
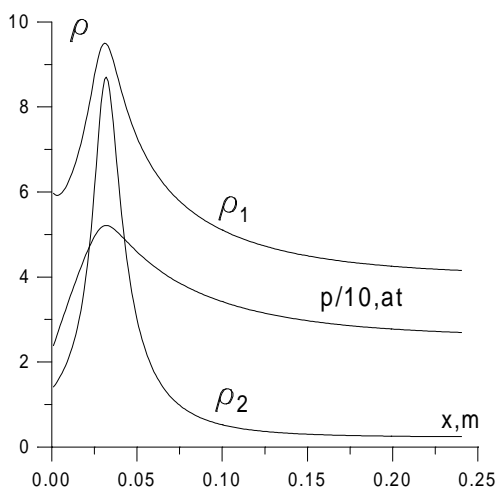


Рис. 9

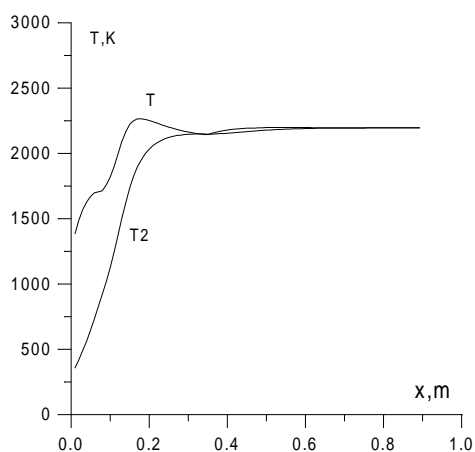


Рис. 11

Рис. 10

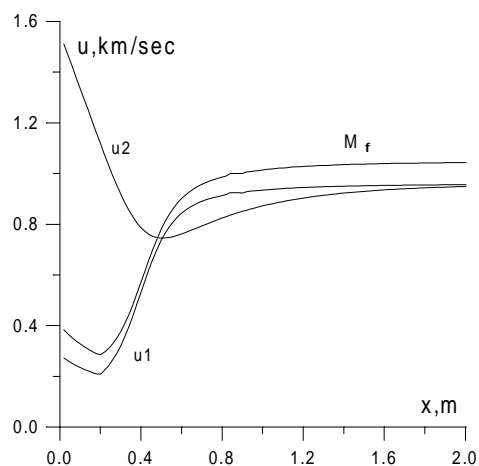


Рис. 12

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 96-01-01886 и 93-01-16405).

### Литература

1. Еремеева Т.А., Медведев А.Е., Федоров А.В., Фомин В.М. К теории идеальной и неидеальной детонации аэровзвесей. Новосибирск, 1986. (Препр. / СО АН СССР, ИТПМ № 37-86).
2. Федоров А.В. Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28, № 3, с. 72-83.
3. Федоров А.В., Фомин В.М., Хмель Т.А. Типы детонационных течений аэровзвеси алюминия в кислороде // Докл. АН РАН. 1995. Т. 342, № 2, с. 185-188.
4. Федоров А.В., Хмель Т.А. Типы и устойчивость детонационных течений аэровзвеси алюминия в кислороде // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 2, с. 74-85.
5. Кузнецов Н.М. Устойчивость структуры ударных и детонационных волн // Хим. физика. 1993. Т. 12, № 3, с. 293-298.
6. Левин В.А., Марков В.В. Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // Физика горения и взрыва. 1975. № 4, с. 623-633.
7. Афанасьева Е.А. Скачки конденсации при горении газовзвесей частиц алюминия за ударной волной // Хим. физика. 1989. Т. 8. № 4, с. 533-538.