

## КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ ПРИ ВЗРЫВАХ

А. Л. Кул<sup>1</sup>, Дж. Б. Белл<sup>2</sup>, В. Е. Бекнер<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ливерморская национальная лаборатория им. Э. Лоуренса, Ливермор, Калифорния, США, kuhl2@llnl.gov

<sup>2</sup>Национальная лаборатория им. Э. Лоуренса в Беркли, Беркли, Калифорния, США

Предложена континуальная модель гетерогенной среды для описания диспергирования и горения облака частиц алюминия при взрыве. Газодинамические законы сохранения рассмотрены совместно с моделью сплошной среды для дисперсной фазы в соответствии с подходом Нигматулина. Процессы межфазного обмена массой, импульсом и энергией описываются в рамках феноменологической модели Хасаинова. Модель горения основана на законах сохранения масс горючего, воздуха и продуктов горения. Источниковые члены представлены для предельного случая мгновенной реакции, что согласуется с моделью массопереноса от частиц к газу в данном газодинамическом поле течения. В модели учтены как дожигание в воздухе продуктов детонации бустерного заряда, так и горение частиц алюминия. Численное интегрирование уравнений для газа и для дискретной фазы проводилось по схеме Годунова высокого порядка. Численно моделировались течения при взрыве заряда ударно-диспергируемого горючего массой 1.5 г в трех различных камерах. При использовании модели критической температуры воспламенения расчетные кривые давления соответствуют записям давления в экспериментах. Однако предсказанное выгорание горючего оказалось несколько выше экспериментального. Возможно, это связано с нестационарными кинетическими эффектами, не включенными в модель.

Ключевые слова: континуальная модель, горение, алюминий, взрыв.

### ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе численно моделируются эксперименты по взрывам зарядов ударно-диспергируемого горючего (УДГ) в различных камерах. Заряд УДГ представляет собой сферическую капсулу бустерного (промежуточного) заряда, заполненную взрывчатым веществом (0.5 г тэна) и помещенную в бумажный цилиндр (рис. 1). Остальной объем (1.6 см<sup>3</sup>) заполнен чешуйчатым алюминием массой 1 г (насыпная плотность 0.604 г/см<sup>3</sup>). Заряд УДГ находится в центре барометрического калориметра, представляющего собой круглый цилиндр следующих размеров:

- калориметр А —  $L = 21$  см,  $D = 20$  см,  $L/D = 1.05$ ,  $V = 6.6$  л,
- калориметр В —  $L = 30$  см,  $D = 30$  см,  $L/D = 1.0$ ,  $V = 21.2$  л,
- калориметр С —  $L = 37.9$  см,  $D = 36.9$  см,  $L/D = 1.03$ ,  $V = 40.5$  л.

В результате взрыва инициирующего заряда распространяется ударная волна, которая

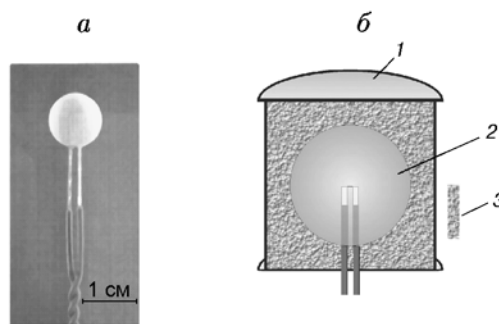


Рис. 1. Конструкция заряда:

*a* — бустерный заряд тэна массой 0.5 г; *б* — алюминизированный заряд УДГ: 1 — бумажный цилиндр, 2 — бустерный заряд тэна (0.5 г, 0.5 см<sup>3</sup>), 3 — порошкообразное горючее в насыпном виде (1 г, 1.6 см<sup>3</sup>)

распыляет порошок алюминия и воспламеняет формирующуюся таким образом взвесь алюминия в воздухе. Далее в процессе взрыва происходит гетерогенное горение облака. Последующее горение продуктов детонации бустерного заряда в воздухе также способствует усилению процесса сгорания алюминия. Давление измерялось пьезоэлектрическими датчиками Kistler

A. L. Kuhl<sup>1</sup>, J. B. Bell<sup>2</sup>, V. E. Beckner<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California, USA. <sup>2</sup>Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, USA.

603В, расположенными на крышке камеры в точках  $r = 5, 7.5, 10, 12.5$  и  $15$  см. Использовались два типа газовой среды: воздух — для исследования турбулентного горения продуктов взрыва в воздухе; азот — для оценки массовой доли прореагировавшего тэна при детонации малого бустерного заряда. Подробное описание техники измерений с использованием барометрических калориметров представлено в [1]. Детали параметрических экспериментальных исследований алюминизированных зарядов УДГ и зарядов ГНТ описаны в [2]. История создания концепции зарядов УДГ изложена в [3–7]. В [8] найдено аналитическое решение задачи турбулентного горения продуктов детонации в камере.

## 1. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

Модель реагирующей двухфазной среды, описывающая процессы горения и взрыва, основана на газодинамических законах сохранения для газовой фазы и континуальном представлении законов сохранения разреженной дискретной фазы в соответствии с подходом Нигматулина [9]. В модели горения [10] учтены как дожигание продуктов детонации бустерного заряда в воздухе, так и горение топлива. Для описания процессов перемешивания и взрывного горения уравнения модели интегрируются с применением метода адаптивного сеточного разрешения (AMR) [11]. Ввиду особой важности вопросов воспламенения при моделировании взрыва, мы сочли уместным представить расширенный обзор по воспламенению облаков частиц алюминия в приложении А.

### Законы сохранения

Модель основана на законах сохранения Эйлера при континуальном описании разреженных гетерогенных сред в формулировке Нигматулина [9]. Эволюция областей горения газовой фазы моделируется в предельном случае больших чисел Рейнольдса и Пекле, когда можно пренебречь эффектами молекулярной диффузии и теплопроводности в газодинамическом поле течения. Течение газа описывается следующими законами сохранения:

— массы:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\sigma}_s, \quad (1)$$

— импульса:

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p) = \dot{\sigma}_s \mathbf{v} - \dot{f}_s, \quad (2)$$

— энергии:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho E + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E + p \mathbf{u}) = \\ = -\dot{q}_s + \dot{\sigma}_s E_s - \dot{f}_s \cdot \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\rho$ ,  $p$ ,  $\mathbf{u}$  — плотность, давление и удельная внутренняя энергия газа,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости газа,  $E \equiv u + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}/2$  — полная энергия газовой фазы, индекс  $s$  соответствует твердым частицам. В источниковых членах в правой части принимаются во внимание массоперенос от частиц к газовой фазе ( $\dot{\sigma}_s$ ), сила сопротивления частиц ( $\dot{f}_s$ ) и теплообмен ( $\dot{q}_s$ ) между газом и частицами.

Дискретная фаза рассматривается как эйлеров континуум. Принимается приближение малых объемных концентраций, где отсутствует взаимодействие частиц между собой, а давление и скорость звука дискретной фазы равны нулю. Изменение массы, импульса и энергии дискретной фазы моделируется в соответствии с законами сохранения механики гетерогенных сред [9]:

— массы:

$$\partial_t \sigma + \nabla \cdot \sigma \mathbf{v} = -\dot{\sigma}_s, \quad (4)$$

— импульса:

$$\partial_t \sigma \mathbf{v} + \nabla \cdot \sigma \mathbf{v} \mathbf{v} = -\dot{\sigma}_s \mathbf{v} + \dot{f}_s, \quad (5)$$

— энергии:

$$\partial_t \sigma e_s + \nabla \cdot \sigma e_s \mathbf{v} = \dot{q}_s - \dot{\sigma}_s e_s, \quad (6)$$

где  $\sigma$  и  $\mathbf{v}$  — плотность и скорость частиц,  $e_s \equiv c_s T_s$  — удельная внутренняя энергия частиц,  $c_s$  — удельная теплоемкость частиц.

### Взаимодействия

Межфазные взаимодействия (массообмен, обмен импульсом, теплообмен) представлены в соответствии с [12]:

— массообмен:

$$\dot{\sigma}_s = \begin{cases} 0, & T_s < T_i, \\ -3\sigma(1 + 0.276\sqrt{\text{Re}_s})/t_s, & T_s \geq T_i; \end{cases} \quad (7)$$

— обмен импульсом:

$$\dot{f}_s = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_s} \frac{\sigma}{d_s} C_D (\mathbf{u} - \mathbf{v}) |\mathbf{u} - \mathbf{v}|, \quad (8)$$

где

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_s} + \frac{4.4}{\sqrt{\text{Re}_s}} + 0.42, \quad \text{Re}_s = \frac{\rho d_s |\mathbf{u} - \mathbf{v}|}{\mu}; \quad (9)$$

— теплообмен:

$$\dot{q}_s = \frac{6\sigma}{\rho_s d_s} \left[ \frac{\text{Nu} \lambda_s (T - T_s)}{d_s} + \varepsilon \sigma_{\text{Boltz}} (T^4 - T_s^4) \right], \quad (10)$$

где

$$\text{Nu} = 2 + 0.6 \text{Pr} \sqrt{\text{Re}_s}, \quad \text{Pr} = c_p \mu / \lambda_g. \quad (11)$$

Здесь  $\rho_s$  — плотность частицы ( $\rho_s = 2.7 \text{ г/см}^3$ ),  $\rho$  — плотность газа,  $d_s$  — диаметр частицы,  $c_p$  — удельная теплоемкость газа при постоянном давлении,  $C_D$  — коэффициент сопротивления,  $\sigma_{\text{Boltz}}$  — постоянная Стефана — Больцмана,  $\varepsilon$  — степень черноты,  $\lambda_s, \lambda_g$  — коэффициенты теплопроводности частицы и газа,  $\mu$  — динамическая вязкость.

Соотношение для времени горения частиц

$$t_s = K d_s^2 \quad (12)$$

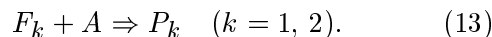
записано согласно [13], где  $K = 150 \text{ с/см}^2$ . Транспортные свойства различных газов перечислены в приложении В.

Законы взаимодействия (7)–(12) успешно использовались в [14] при моделировании стационарной плоской двухфронтной детонации в смесях реагирующих газов с добавками взвеси частиц алюминия. В настоящей работе учитывается переход частицы алюминия в жидкое состояние при  $T_l = 932 \text{ К}$ . Считается, что после перехода в жидкую фазу капли быстро формируют микротуман за счет интенсивного ускорения потоком газа, как было показано в [15] для капель гексана. Соответственно этому для жидкой фазы принимается скоростное и темпе-

ратурное равновесие с газом и предполагается, что микротуман обладает способностью к диффузионному горению (ограниченному скоростью доставки окислителя) до достижения температуры кипения Al ( $\approx 2300 \text{ К}$ ).

## Горение

Рассматриваются два горючих компонента: продукты детонации тэна ( $F_1$ ) (табл. 1) и алюминий ( $F_2$ ), а также продукты горения тэна ( $P_1$ ) и алюминия ( $P_2$ ) в воздухе (табл. 2). Моделируется совместное горение обоих компонентов ( $F_k$ ) в воздухе (A) с образованием равновесных продуктов горения ( $P_k$ ):



Для массовых долей компонентов  $Y_k$  справедливы законы сохранения:

— топливо:

$$\partial_t \rho Y_{F_k} + \nabla \cdot \rho Y_{F_k} \mathbf{u} = -\dot{s}_k + \delta_{k2} \dot{\sigma}_k, \quad (14)$$

— воздух:

$$\partial_t \rho Y_A + \nabla \cdot \rho Y_A \mathbf{u} = -\sum_k \alpha_k \dot{s}_k, \quad (15)$$

— продукты:

$$\partial_t \rho Y_{P_k} + \nabla \cdot \rho Y_{P_k} \mathbf{u} = \sum_k (1 + \alpha_k) \dot{s}_k. \quad (16)$$

Таблица 1  
Продукты детонации тэна ( $\rho_0 = 1 \text{ г/см}^3$ )  
при  $p = 1 \text{ МПа}$ ,  $T = 298 \text{ К}$

Продукты, моль/кг				
H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>
11.3	10.8	6.3	5.0	1.3

Таблица 2

Равновесный состав продуктов горения при  $T = T_{ad}$

Смесь	Продукты, моль/кг								
	H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	O	NO	CO	Al	[Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ] <sub>(l)</sub>
Тэн — воздух ( $\sigma_s = 0.482$ )	7.6	6.1	12.8	2.3	—	—	4.6	—	—
Al — воздух ( $\sigma_s = 4.03$ )	—	—	21.6	0.15	1.1	0.6	—	0.99	3.21

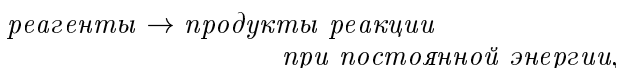
$\sigma_s$  — стехиометрический коэффициент (окислитель/топливо).

Здесь  $\delta_{k2}$  — символ Кронекера ( $\delta_{12} = 0, \delta_{22} = 1$ ). Горючее и воздух расходуются в стехиометрических пропорциях:  $\alpha_k = A/F_k$ . В вышеприведенных уравнениях  $\dot{s}_k$  — источник член, соответствующий глобальной кинетике. В настоящей работе принимается приближение мгновенной химической реакции, что согласуется с моделью газодинамики невязкой среды (1)–(3). Таким образом, как только горючее и воздух попадают в вычислительную ячейку, они расходуются на одном временном шаге. Член  $\delta_{k2}\dot{\sigma}_k$  выражает переход Al из конденсированной фазы в газовую, что формирует источник паров алюминия. Ограничения модели с мгновенной химической реакцией рассмотрены в § 3. Кинетическая модель, основанная на измеренных задержках зажигания облака частиц алюминия, изложена в приложении А.

### Уравнения состояния

Компьютерный код отслеживает в каждой ячейке плотность смеси, удельную внутреннюю энергию и состав газовой смеси. Эти параметры используются для вычисления давления и температуры в расчетной ячейке в соответствии с уравнениями состояния. Термодинамические состояния при взрывах УДГ проанализированы в [16]. Здесь отмечаются только отличительные особенности, важные для численного моделирования.

На рис. 2 представлены положения состояний на диаграмме Ле Шателье: зависимости удельной внутренней энергии  $u$  от температуры  $T$ . Кривые на рис. 2,а построены для «замороженных» реагирующих компонентов: продуктов детонации тэна ( $F_1$ ), алюминия (Al) и воздуха (A); на рис. 2,б — для соответствующих равновесных продуктов горения ( $P_k$ ). В такой постановке горение соответствует преобразованию вещества по схеме:



что обеспечивает значения температуры горения 3 175 К для системы тэн — воздух и 4 120 К для системы Al — воздух (см. рис. 2,а). Система изоэнергетична, поэтому в уравнениях энергии для газовой (3) или дискретной (6) фаз нет добавки энергии (т. е. «теплоты сгорания»). В реагирующей ячейке до горения используются уравнения состояния реагентов, а после сгорания — уравнения состояния продуктов реакции.

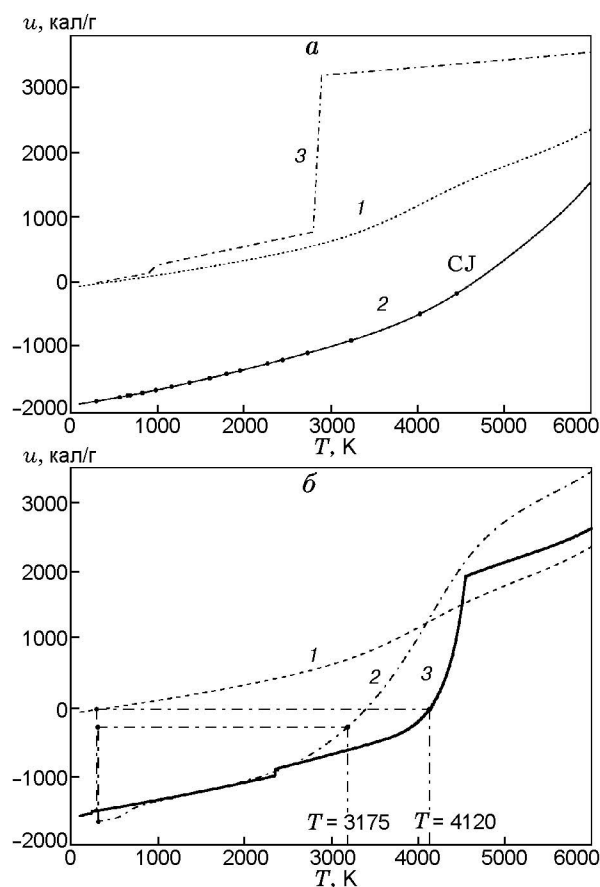


Рис. 2. Зависимость удельной внутренней энергии компонентов системы от температуры:

а — для «замороженных» реагентов: 1 — воздух,  $p = 10$  атм, 2 — тэн, изоэнтропа  $S = 2$  кал/(г · К), 3 — инертный алюминий; б — для равновесных продуктов горения: 1 — воздух,  $p = 10$  атм, 2 — тэн — воздух,  $\sigma_s = 0.482$ ,  $p = 10$  атм, 3 — алюминий — воздух,  $\sigma_s = 4.03$ ,  $p = 10$  атм

В [16] было показано, что при  $T < 3500$  К компоненты  $F_k$ , Al, A,  $P_k$  ведут себя как calorically perfect gas. Таким образом, внутреннюю энергию можно представить как функцию только температуры. Для указанных компонентов использовались кусочно-гладкие квадратичные функции:

$$u_c(T) = a_c T^2 + b_c T + c_c \quad (17)$$

$$(c = A, F_k, Al, P_k).$$

Соответствующие значения коэффициентов  $a_c$ ,  $b_c$ ,  $c_c$  приведены в таблицах в приложении С. Для расчетных ячеек, содержащих смеси компонентов, энергия смеси также описывается квадратичной формулой:

$$u_m(T) = \sum_c Y_c u_c = a_m T_m^2 + b_m T_m + c_m, \quad (18)$$

где коэффициенты для смеси определяются как осредненные по массе величины:

$$a_m = \sum_c Y_c a_c, \quad b_m = \sum_c Y_c b_c, \quad (19)$$

$$c_m = \sum_c Y_c c_c, \quad R_m = \sum_c Y_c R_c,$$

где  $R_m$  — универсальная газовая постоянная для смеси. При заданной удельной внутренней энергии  $u_m$  температура смеси может быть определена из решения (18):

$$T_m = \frac{-b_m + \sqrt{b_m^2 - 4a_m(c_m - u_m)}}{2a_m}. \quad (20)$$

В «чистых» ячейках давление компонентов вычисляется по уравнению состояния совершенного газа

$$p_c = \rho_c R_c T_c$$

или по уравнению состояния Джона — Уилкинса — Ли для газообразных продуктов детонации [16]

$$p_{JWL}(v, T) = A \left( 1 - \frac{\omega v_0}{R_1 v} \right) \exp \left( -R_1 \frac{v}{v_0} \right) + B \left( 1 - \frac{\omega v_0}{R_2 v} \right) \exp \left( -R_2 \frac{v}{v_0} \right) + \frac{RT}{v}, \quad (21)$$

где  $v = 1/\rho$  — удельный объем,  $v_0 = 1/\rho_0$ ,  $\rho_0 = 1 \text{ г/см}^3$ ,  $A = 5.80227 \cdot 10^6 \text{ атм}$ ,  $B = 0.09301 \cdot 10^6 \text{ атм}$ ,  $R_1 = 7.00$ ,  $R_2 = 1.695$ ,  $\omega = 0.246$ . Заметим, что в данной постановке функция (21) пригодна как вдоль изоэнтропы продуктов взрыва (члены с коэффициентами  $A$  и  $B$ ) при малых расширениях, так и вне изоэнтропы (третий член — уравнение совершенного газа) при больших расширениях. Так как удельная внутренняя энергия квадратична по температуре (17), (18), здесь неявно учитывается изменение теплоемкости при постоянном объеме:  $c_v(T) = 2aT + b$ . Очевидно, что такой подход точнее, чем обычные модели Джона — Уилкинса — Ли с постоянными теплоемкостями продуктов детонации. В смешанных ячейках давление смеси определяется аддитивно по температурам [17]:

$$p_m = \sum_c p_c(V_m, T_m), \quad (22)$$

где  $p_c(V_m, T_m)$  — давление, создаваемое одним компонентом смеси при заданных значениях температуры и объема смеси.

### Численные методы

Уравнения (1)–(6) и (14)–(16) интегрировали с применением противопотокового метода высокого разрешения, представляющего собой обобщение схемы Годунова высокого порядка [18]. Алгоритм для газовой фазы основан на эффективном решателе Римана, развитом в [19, 20] и расширенном на обобщенные законы сохранения в [21] и на нерасщепляющиеся противопотоковые схемы в [22]. Решатель был модифицирован на случай учета отрицательных удельных внутренних энергий (см. рис. 2), присущих данной термодинамической модели. Алгоритм для законов сохранения дискретной фазы основан на решателе Римана для двухфазных течений, развитом в [23]. Граничное условие для фазы частиц на твердой стенке отвечает упругому отражению (задается обращение импульса). Для источниковых членов в (1)–(6) и (14)–(16) применялся метод расщепления Странга. Таким образом, в предложенном подходе интегрирование основано на решателях Римана; информация распространяется вдоль характеристик с соответствующей волновой скоростью; в течение временного шага учитываются нелинейные волновые взаимодействия в ячейке. Предусматривается ограничение шага (выравнивание крутизны), что автоматически уменьшает порядок точности на разрывах, при этом в областях гладких решений схема имеет второй порядок по времени и пространству.

Схемы Годунова объединены с алгоритмом AMR, позволяющим детализировать расчетные схемы в сложных областях потока, таких как слои перемешивания и зоны реакции. Использованные адаптивные методы основаны на блочно-структурированных алгоритмах AMR [24, 25] и методе Белла [26], расширенном на трехмерные гиперболические системы. Для неправильных геометрических конфигураций применялись методы вложенных границ [27]. В данной реализации подхода AMR области сгущения сетки организованы как прямоугольные участки с числом ячеек от нескольких сотен до нескольких тысяч в каждом. Сгу-

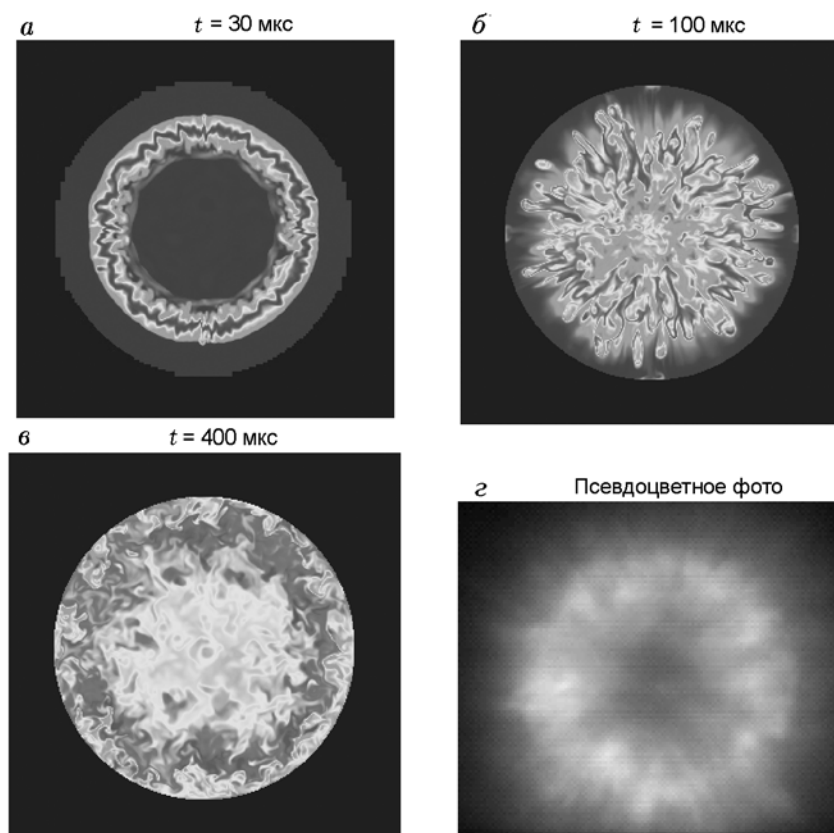


Рис. 3. Поля температур в поперечном сечении ( $z = 10$  см) при горении облака частиц Al на воздухе в калориметре А

щения производились на поверхностях фронтов пламени и ударных волн в соответствии с оценками погрешности по методу Ричардсона. Участки сетки распределялись по процессорам на основе оценок рабочей загрузки [28]. Таким образом, программы AMR эффективно работают на широкомасштабных параллельных компьютерах [29].

Метод AMR также используется для детализации областей турбулентного перемешивания; последовательными сгущениями расчетной сетки удается найти энергонесущие масштабы турбулентности. Таким способом метод позволяет рассчитать эффекты турбулентного перемешивания без детального моделирования турбулентности. Это совместимо с так называемым подходом MILES (моделирование крупных вихрей с монотонным интегрированием) [30–32]. Детальный обзор неявных методов моделирования крупных вихрей (ILES) дан в [33]. Способность применяемой схемы Годунова воспроизводить спектр Колмогорова турбу-

лентных пульсаций была продемонстрирована в [34]. Способность схемы проследивать интенсификацию вихря во время перехода к турбулентности описана в [35]. Схема использовалась также для предсказания перехода в сдвиговых слоях Кельвина — Гельмгольца. Было установлено, что расчетные средние профили и профили второго порядка хорошо согласуются с экспериментальными данными [36].

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ

### Калориметр А

Программный код AMR для трехмерных двухфазных течений был использован для моделирования процессов взрыва и последующего турбулентного горения в воздухе заряда алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре А. Поля температур в поперечном сечении сборки ( $z = 10$  см) представлены на рис. 3 в различные моменты времени процес-

са горения. Продукты детонации тэна из бустерного заряда внедряются в окружающий порошок алюминия. Частицы алюминия, взаимодействуя с продуктами детонации через сопротивление и теплообмен, ускоряются и нагреваются. Продукты детонации тэна также смешиваются с воздухом, что способствует их дожиганию. При этом воспламеняются частицы Al, таким образом инициируется зона горения алюминия в воздухе. Через 30 мкс расширяющаяся оболочка двухфазного горения уже сформировалась (см. рис. 3,а). Вследствие интенсивного начального ускорения за счет увлечения потоком газа, частицы обладают большой радиальной скоростью. Через 100 мкс они организуются в пальцеобразные образования (радиальную бороздчатость), формируя двухфазные горячие струи (рис. 3,б). Это представляет собой двухфазный аналог грибообразных струй горения, которые формируются на границе раздела горючее — воздух при переходе к турбулентному горению в газовых системах [37]. У фазы частиц отсутствует собственное давление, таким образом, в ней нет бароклинного механизма ( $\nabla p \times \nabla \rho$ ), порождающего собственный вихрь. Поэтому на поверхности раздела воздуха и реагирующих частиц вращательные структуры не формируются. Отражения взрывной волны от стенок камеры интенсифицируют перемешивание, что способствует горению. Через 400 мкс облако горения заполняет камеру, и энерговыделение продолжается в распределенном режиме горения (рис. 3,в). Пальцеобразная бороздчатость, отмеченная в моделировании при 100 мкс, также наблюдалась в экспериментах (рис. 3,г). Это служит иллюстрацией того, что при использовании AMR численное моделирование способно воспроизводить структуры турбулентного перемешивания на вычислительной сетке.

Профили давления при взрыве алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре А представлены на рис. 4; сигналы датчиков давления показаны для ранней и поздней стадий. Соответствующая кривая, полученная численно (жирная черная линия), подобна экспериментальной записи при длительности 3 мс. Обе кривые лежат намного выше, чем запись давления взрыва в среде азота, иллюстрируя, таким образом, существенное влияние горения на параметры поля давления. Отметим, что на рис. 4 к расчетному времени  $t_{calc}$  добавлена величина  $t_0 = 26.4$  мкс, для того чтобы согласо-

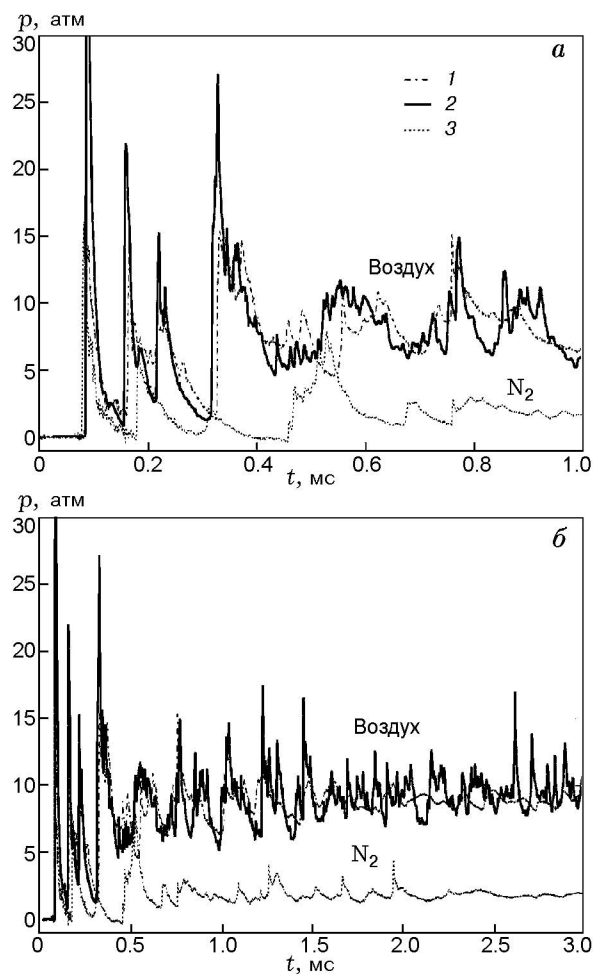


Рис. 4. Профили давления при взрыве заряда алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре А объемом 6.6 л:

а — на ранней стадии, б — на поздней стадии ( $r = 5$  см,  $z = 10.5$  см); 1 — Al — воздух, датчик 1; 2 — расчет двухфазного течения по трехмерному коду AMR (+26.4 мкс); 3 — Al—N<sub>2</sub>, датчик 1

вать модельное время прихода ударной волны с экспериментом ( $t = t_{calc} + t_0$ ). Это интерпретируется как эффективное время зажигания частиц. Данный эффект будет проанализирован в § 3. Отметим также, что экспериментальная запись давления на поздней стадии выглядит более сглаженной, чем в расчетах. По-видимому, поле течения в экспериментах демонстрирует более диссипативное поведение, чем в численном моделировании. Однако скорость энерговыделения при моделировании, по-видимому, близко соответствует экспериментальной, поскольку профили давления согласуются очень хорошо.

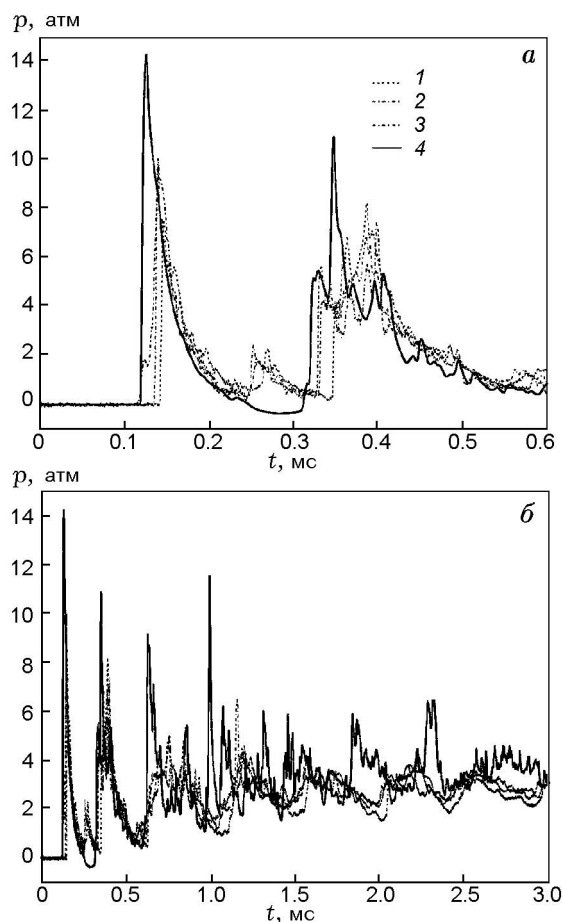


Рис. 5. Профили давления при взрыве заряда алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре В объемом 21.2 л:

*a* — на ранней стадии, *б* — на поздней стадии ( $r = 5$  см,  $z = 15$  см); А1 — воздух: 1 — датчик 2, 2 — датчик 3, 3 — датчик 4; 4 — расчет по трехмерному коду AMR,  $T_{ign} = 993$  К

### Калориметр В

Код AMR использовался для моделирования взрыва алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре В. На рис. 5 сравниваются расчетные профили давления на верхней стенке камеры при  $r = 5$  см с записями трех датчиков. Профиль, полученный численно (линия 4), качественно совпадает с формами сигналов давления в экспериментах. Среднее расчетное значение на момент времени 3 мс, как видно, несколько выше, чем осредненное по показаниям трех датчиков в экспериментах.

### Калориметр С

Код AMR использовался также для моде-

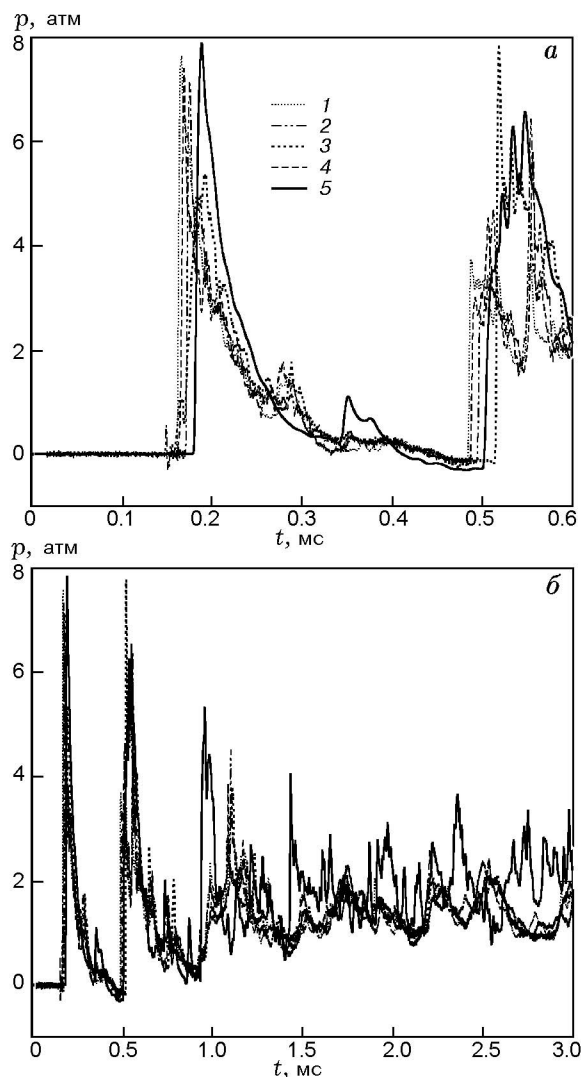


Рис. 6. Профили давления при взрыве заряда алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре С объемом 40.5 л:

*a* — на ранней стадии, *б* — на поздней стадии ( $r = 5$  см,  $z = 19$  см); А1 — воздух: 1 — датчик 1, 2 — датчик 2, 3 — датчик 3, 4 — датчик 4; 5 — расчет по трехмерному коду AMR,  $T_{ign} = 993$  К

лирования взрыва заряда алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметре С. На рис. 6 расчетные профили давления на верхней стенке камеры при  $r = 5$  см сравниваются с записями четырех датчиков. Форма кривой 5, полученной численно, качественно совпадает с формой сигнала в экспериментах. Среднее расчетное значение давления в момент времени 3 мс, как видно, несколько выше, чем осредненное по данным четырех датчиков в экспериментах.



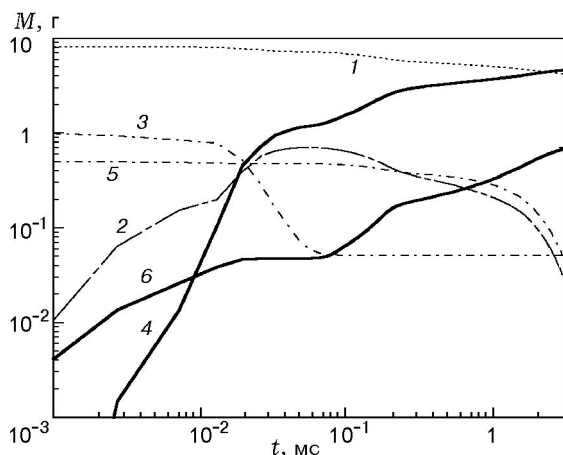


Рис. 7. Результаты численного моделирования изменения масс компонентов при горении в калориметре А:

1 — воздух, 2 — пары Al, 3 — частицы Al, 4 — продукты горения Al в воздухе,  $\sigma_s = 4.03$ , 5 — продукты детонации тэна, 6 — продукты горения тэна в воздухе,  $\sigma_s = 0.482$

#### Изменение массового состава

Результаты численного моделирования изменения масс компонентов в калориметре А представлены на рис. 7. Видно, что к моменту времени 50 мкс частицы алюминия в основном испаряются, вследствие чего со временем образуется металлическое горючее (парообразный алюминий) и увеличивается масса продуктов горения Al и тэна в воздухе. Кроме того, видно, что примерно с момента времени 100 мкс начинается расходование продуктов детонации тэна и образование продуктов горения тэна в воздухе.

#### Расход горючего

На рис. 8 показано изменение массовых долей расходующихся в процессе горения горючих компонентов  $\eta(t)$ . Наклон кривых представляет обобщенную скорость горения  $\dot{\eta}(t)$ . В разных калориметрах скорости горения различны, так как на турбулентное перемешивание оказывает влияние геометрия камеры (например, расстояние до стенки камеры, объем камеры и т. д.). Тем не менее к моменту времени 3 мс во всех случаях  $\approx 90 \div 97$  % алюминия и  $\approx 80 \div 90$  % продуктов взрыва тэна расходуются при горении в воздухе.

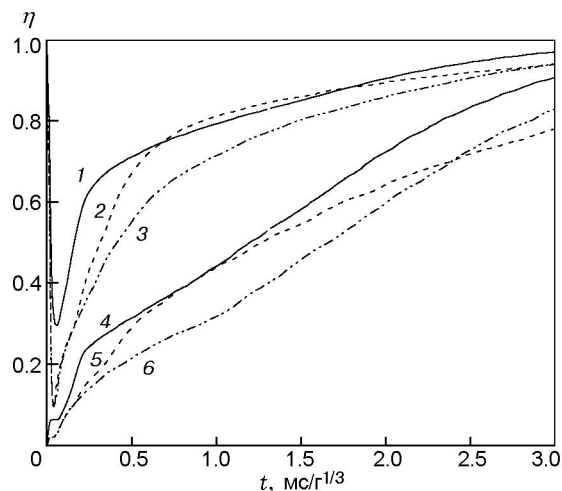


Рис. 8. Расчет изменения масс компонентов при горении в различных калориметрах:

продукты горения Al в воздухе: 1, 2, 3 — соответственно калориметры А, В, С; продукты горения тэна в воздухе: 4, 5, 6 — соответственно калориметры А, В, С

#### Полнота горения

Для того чтобы построить кривые изменения импульса, были проинтегрированы профили давления, приведенные на рис. 4-6:

$$I(t) = \int_0^t \Delta p(t') dt'. \quad (23)$$

Затем зависимости импульса от времени в интервале  $0.5 < t < 3$  мс были аппроксимированы линейной функцией  $I(t)_{fit} = a + \Delta \bar{p}_c t$ . Угловой наклон этой зависимости равен среднему избыточному давлению в камере  $\Delta \bar{p}_c$ . В соответствии с теорией, при горении в термодинамически изолированной камере [8] асимптотическое значение массовой доли продуктов горения  $Y_p^\infty$  можно оценить по соотношению

$$Y_p^\infty = [\bar{p}_c - p_R] / [p_p - p_R]. \quad (24)$$

Здесь  $p_R$  и  $p_p$  — давление в камере, создаваемое соответственно «замороженными» продуктами реакции и равновесными продуктами горения (соответствующими продуктам взрыва при постоянном объеме, предсказываемым кодом Cheetah). Результаты вычислений для  $Y_p^\infty$  представлены в табл. 3 и графически на рис. 9 в виде функции от объема камеры  $V_c$ . Согласно эксперименту массовая доля продуктов достигала 76 % и затем уменьшалась до 42 %

Таблица 3  
Сравнение экспериментальных значений  
массовых долей с расчетными

Калориметр	$\Delta \bar{p}_c$ , атм	$\bar{p}_c$ , атм*	$Y_{p,c}$ , %
А: эксперимент расчет	8.8417	9.8197	76.4
	9.2602	10.1382	86.2
В: эксперимент расчет	2.8911	3.86905	52.7
	3.4139	4.3919	65.1
С: эксперимент расчет	1.4159	2.3939	41.9
	1.7749	2.7529	56.4

\*  $\bar{p}_c = p_a + \Delta \bar{p}_c$ , где  $p_a = 0.978$  атм (давление в лаборатории ЕМІ).

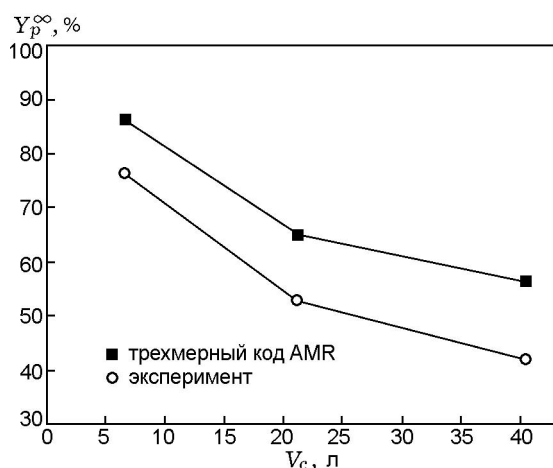


Рис. 9. Зависимость массовой концентрации продуктов горения от объема калориметра

при увеличении объема камеры. Мы объясняем это эффектом гашения. В больших калориметрах реализуется более слабый нагрев массы воздуха за счет отраженной ударной волны, поскольку стенки расположены на большом удалении от взрывающегося заряда. Когда относительно холодная масса воздуха внедряется в горящее облако, это приводит к эффективному снижению температуры газа и соответствующему замедлению (гашению) химических реакций. Рассчитанное изменение величины  $Y_p^\infty$  с ростом  $V_c$  качественно соответствует экспериментальному, но абсолютные значения превышают экспериментальные на  $10 \div 14$  %. Это несоответствие может быть вызвано несовершенством принятой модели зажигания.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ

В принятой модели горения предполагается, что скорость образования продуктов го-

рения зависит только от скорости приведения в контакт молекул топлива и окислителя за счет турбулентного перемешивания. Это мы называем предельным случаем быстрой химической реакции. Данная модель горения, лимитированного перемешиванием, успешно показала себя при моделировании дожигания газообразных продуктов детонации ТНТ в воздухе в шести рассмотренных ранее случаях: трех калориметрических камерах и трех калориметрических туннелях [10].

Тем не менее, в двухфазных системах воспламенение и горение существенно зависят от физико-химических процессов межфазного взаимодействия. Эксперименты по воспламенению индивидуальных частиц и взвесей частиц алюминия и соответствующие модели рассмотрены в приложении А. На основе данных, представленных в приложении А, определены два характерных значения температуры воспламенения:

- $T_{ign} = 933$  К — по экспериментальным данным [38] по факелам порошкового Al;
- $T_{ign} = 1785$  К — по расчету [39] теплового взрыва.

Критерий воспламенения в виде  $T \geq T_{ign}$  добавлен в модель горения, и расчеты взрыва УДГ в калориметре В проведены повторно. Расчетные профили давления представлены на рис. 10. Профили давления, полученные при использовании любой из названных выше температур воспламенения (933 и 1785 К), оказались практически одинаковыми. Времена прибытия, а также профили давления для первой, второй и третьей взрывных волн совпали с экспериментальными измерениями (данные датчиков 2–4, кривые 4–6 на рис. 10). Кроме того, на рис. 10 показаны результаты расчета по коду AMR для случая, когда критерий воспламенения отсутствует (т. е. воспламенение частиц Al происходит мгновенно, линия 3). В этом случае ударная волна по расчету прибывает на 26 мкс раньше, чем в эксперименте, а расчетный профиль давления отличается от экспериментального. Таким образом, введение критерия зажигания по температуре частицы для расчета задержки воспламенения и последующего энерговыделения, которое обеспечивает задержку прибытия взрывной волны на 26 мкс, оказывается достаточным для согласования теоретических и экспериментальных значений времени прибытия ударной волны. Поэтому мы определяем величину 26 мкс как эффективное время

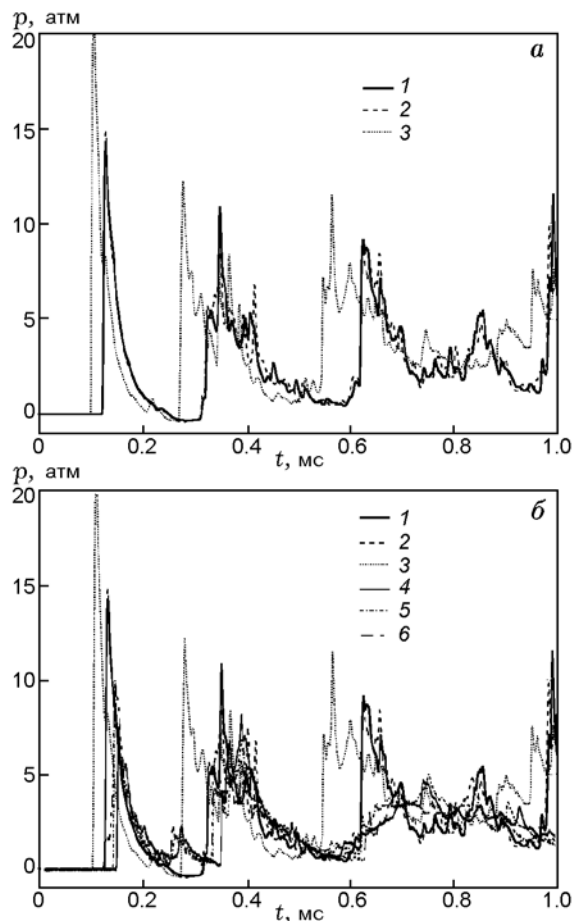


Рис. 10. Сравнение расчетных профилей давления с учетом и без учета температуры воспламенения с данными экспериментов (калориметр В,  $r = 5$  см,  $z = 15$  см):

а — расчет по коду AMR: 1 —  $T_{ign} = 993$  К, 2 —  $T_{ign} = 1785$  К, 3 — без учета  $T_{ign}$ ; б — сравнение с экспериментом, А1 — воздух: 4 — датчик 2, 5 — датчик 3, 6 — датчик 4

воспламенения частиц Al. Данные экспериментов [40, 41] по ударно-волновому воспламенению взвесей алюминиевых частиц приведены в обобщенном виде в приложении А. Измеренные задержки воспламенения характеризуются аррениусовской зависимостью

$$t_{ign} = a \exp \frac{E_a}{RT}. \quad (25)$$

Энергия активации определена как  $E_a = 60$  ккал/моль, предэкспоненциальный множитель равен  $a = 1.6 \cdot 10^{-8}$  с для чешуек алюминия и  $a = 2.5 \cdot 10^{-8}$  с для сферических частиц диаметром  $3 \div 5$  мкм. В предположении, что за-

держки воспламенения составляют 26 мкс (как следует из результатов моделирования, показанных на рис. 4 и 5), вышеприведенное соотношение подразумевает эффективную температуру воспламенения 4060 К для нестационарного ударно-волнового воспламенения облака хлопьевидного алюминия при взрыве УДГ. Это значение близко к адиабатической температуре пламени 4120 К при горении стехиометрической взвеси Al в воздухе. Отметим, что эффективная температура воспламенения  $T_{ign}$ , определенная по формуле (25), слабо (логарифмически) зависит от задержки зажигания. Задержки в диапазоне  $20 \div 30$  мкс дают близкие эффективные температуры воспламенения 4200 и 3980 К соответственно.

Поля температур в поперечном сечении в различные моменты времени при AMR-моделировании взрыва в калориметре В представлены на рис. 11. Они показывают, что на ранних стадиях ( $t < 83$  мкс) горение происходит на поверхности смешивающихся пальцевобразных выступов. Можно ожидать, что скорость горения ограничивается скоростью турбулентного перемешивания. К моменту времени 100 мкс процесс горения переходит в распределенный в объеме режим. Баллистическое перемешивание частиц Al с воздухом ведет к равномерному распределению окислителя по всему облаку, и можно предположить, что горение будет контролироваться кинетикой химических реакций. В более поздний период времени (596 мкс) поперечное сечение горящего облака принимает форму, подобную сечению камеры сгорания (правильный круговой цилиндр). Эта форма облака стимулирована осевыми и поперечными отражающимися ударными волнами внутри камеры.

В представленной формулировке проблемы предполагается, что система ведет себя как гетерогенная сплошная среда с малой объемной концентрацией дискретной фазы, и это приближение действительно на протяжении большей части времени взрыва. Однако на начальной стадии диспергирования облако частиц Al сжато газами от взрыва промежуточного заряда, при этом проявляются эффекты плотной среды, такие как столкновения частиц между собой. В этом режиме при столкновении частиц возникает эффективное давление компактирования, которое ограничивает сжатие дискретной фазы. Кроме того, при высокой плотности частиц возникают эффекты сопротивления

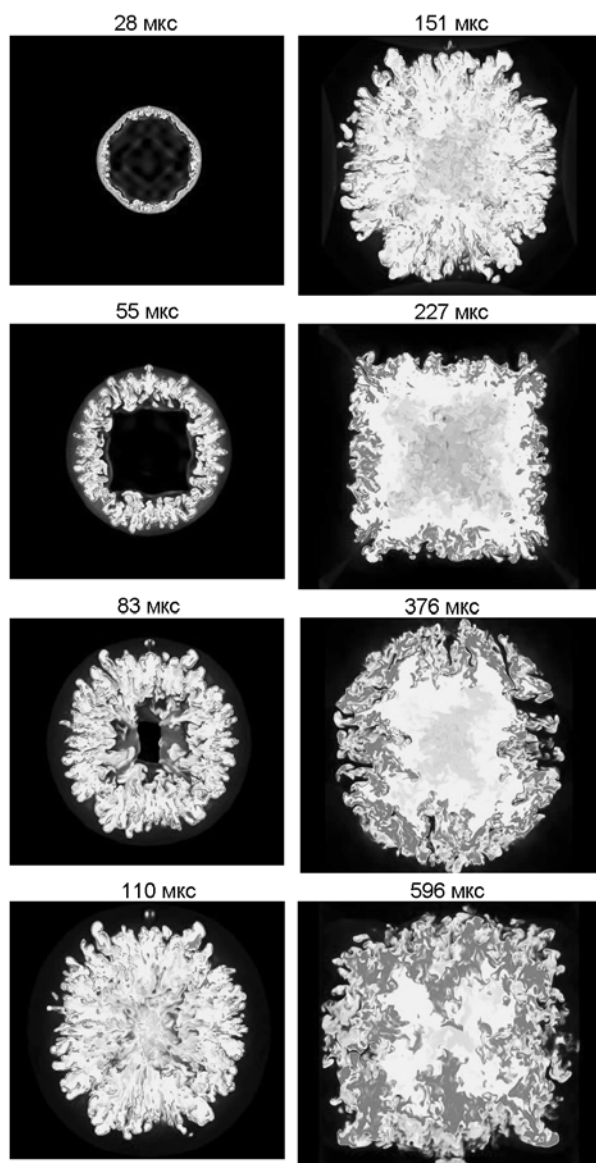


Рис. 11. Поле температур в поперечном сечении, расположенном в центре сборки, при взрыве 1.5 г алюминизированного заряда УДГ в камере В

кластеров частиц, что более сильно связывает непрерывную и дискретную фазы. Эти эффекты проявляются в течение времени задержки воспламенения частиц и могут влиять на процесс воспламенения. Такие эффекты должны быть исследованы в будущем на основе моделей плотной гетерогенной среды.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием двухфазного кода AMR проведено численное моделирование взрывов и горения зарядов алюминизированного УДГ массой 1.5 г в калориметрах объемом 6.6, 21.2 и 40.5 л. Расчетные профили давления качественно подобны зарегистрированным в экспериментах формам сигнала. Однако, чтобы получить хорошее согласование по времени прибытия и профилям первой и второй ударных волн, в модель горения был включен температурный критерий воспламенения. Результаты расчетов оказались нечувствительны к температуре воспламенения, т. е. расчетные профили при  $T_{ign} = 933$  и  $1785$  К подобны.

На основе сравнения расчетного времени с экспериментальным для прибытия ударной волны к стенке ( $r = 5$  см) в калориметрах А и В было определено время задержки воспламенения частицы, составившее 26.4 мкс. Отсюда получена оценка для эффективной температуры воспламенения 4060 К в аррениусовской модели воспламенения (25). Значение 4060 К, по существу, совпадает с адиабатической температурой пламени для горения Al в воздухе. Очевидно, конструкция заряда УДГ (где частицы Al ускоряются продуктами детонации промежуточного заряда, нагретыми до 3175 К) обеспечивает намного более сильный источник воспламенения, чем источники воспламенения в экспериментах [38, 40] (1000 ÷ 1800 К).

Скорость горения смеси в разных калориметрах различна, так как на турбулентное перемешивание влияет геометрия камеры. Асимптотическая оценка массовой доли продуктов горения  $Y_p^\infty$  дала 76 % для калориметра объемом  $V_c = 6.6$  л и 42 % для калориметра увеличенного объема,  $V_c = 40.5$  л, в связи с усилением эффекта гашения в больших объемах воздуха. Аналогичные тенденции продемонстрировали численные расчеты, но предсказанные значения доли продуктов на 10 ÷ 14 % превысили экспериментальные. Для устранения разногласия необходимо усовершенствовать модель зажигания.

Описание воспламенения взвеси частиц алюминия при взрывах УДГ характеризуется дополнительным уровнем сложности из-за характерной нестационарности задачи. Воспламенение зависит от большого числа факторов, а не только от температуры воспламенения.

Оно зависит от конкуренции между интенсивностями нагрева и охлаждения, т. е. между величинами:

- (i) скорости, с которой частицы нагреваются газообразными продуктами детонации, воспламеняются и нагревают окружающие газы за счет горения,
- (ii) скорости, с которой окружающие газы охлаждаются при расширении взрывной волны за счет радиационных потерь и захвата более прохладного воздуха при турбулентном перемешивании.

Поэтому поведение облака частиц Al зависит от результирующего итога актов воспламенений по всем фракциям распределения частиц по размерам. Для учета указанных эффектов необходимо привлечь кинетическую модель воспламенения.

Работа выполнена под эгидой Департамента энергии США в Ливерморской национальной лаборатории им. Э. Лоуренса, Университета Калифорнии (контракт № W-7405-Eng-48), при спонсорской поддержке Агентства снижения угрозы обороне (контракты IACRO № 06-40731 и IACRO № 09-45091), UCRL-CONF 231319&LLNL-JRNL-417022.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ОДИНОЧНЫХ ЧАСТИЦ И ОБЛАКОВ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

#### Измерение температуры воспламенения одиночной частицы

Пределы воспламенения частиц алюминия исследовались в экспериментах [38] по горению порошка в горелках. Измерены температуры воспламенения частиц алюминия в кислороде, разбавленном аргоном и азотом. Результаты суммированы на рис. А1, который показывает, что температура воспламенения частицы  $T_{ign}$  зависит как от концентрации кислорода, так и от диаметра частиц. Температура воспламенения в экспериментах меняется от значения  $2057\text{ }^\circ\text{C}$  (соответствующего температуре, близкой к точке плавления  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) до величины  $696\text{ }^\circ\text{C}$  (близкой к температуре плавления чистого алюминия  $660\text{ }^\circ\text{C}$ ). Данные аппроксимируются функцией [42]

$$T_{ign} = f(d_s, C_{ox}) =$$

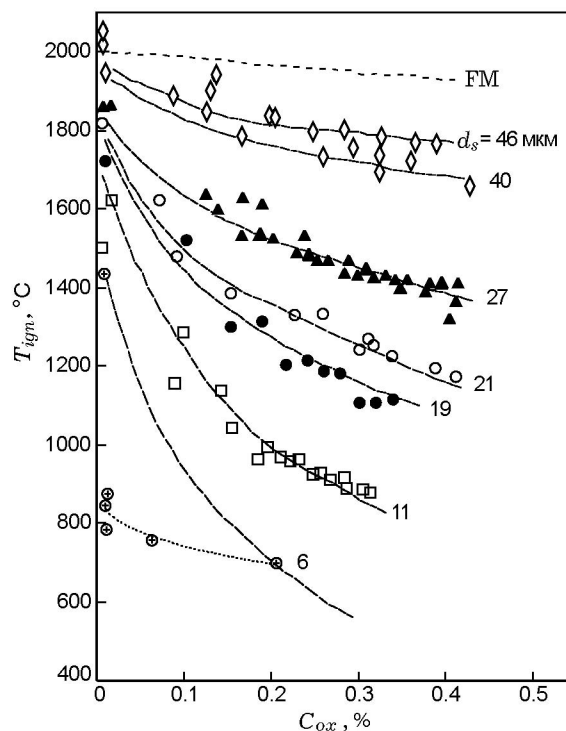


Рис. А1. Температуры воспламенения одиночной частицы алюминия в кислороде, разбавленном аргоном и азотом, по данным [38]:

сплошные линии — уравнение (A1); штриховая линия FM — результаты Фридмана — Мачека [42]; пунктирная линия соединяет экспериментальные точки для частиц диаметром  $d_s = 6$  мкм

$$= T_{mpo} - 0.6 - \frac{C_{ox}^{0.3} d_s}{\lambda} \exp(-0.85\sqrt{d_s}), \quad (\text{A1})$$

где  $T_{mpo}$  — точка плавления покрывающей частицу оксидной пленки ( $\approx 2027\text{ }^\circ\text{C}$ ),  $\lambda$  — теплопроводность газа. Минимальная измеренная температура воспламенения составила  $696\text{ }^\circ\text{C}$  для частиц диаметром 6 мкм при стехиометрии.

#### Модель теплового взрыва

В работе [43] сформулированы основные принципы тепловой теории воспламенения металлической частицы. Здесь мы следуем работе [39], где эта теория применена для моделирования воспламенения одиночной частицы алюминия в кислороде. Модель предсказывает для частиц диаметром 6 мкм минимальную температуру воспламенения  $1785\text{ K}$ . Эта величина согласуется с экспериментальными данными [38] ( $1710\text{ K}$ ) при очень низких концентрациях кислорода ( $C_{ox} = 0.009\text{ }%$ ). Значения

температур воспламенения аппроксимируются следующей функцией:

$$T_{ign} [\text{K}] = 1.785 + (0.45/t_{ign})^3.$$

Эту формулу можно обратить и выразить задержку воспламенения через кубический корень от значения температуры:

$$t_{ign} [\text{мс}] = 0.45/(T_i - 1.785)^{1/3}$$

$$\text{при } 1.785 < T_i < 2.800 \text{ К.}$$

Задержки воспламенения меняются от 34 мкс при 4000 К и 45 мкс при 2800 К до бесконечности при 1785 К.

Модель теплового взрыва [39] также предсказывает задержки воспламенения частиц различных размеров. Расчетные значения задержки согласуются с данными [44]. Результаты измерений аппроксимируются следующей функцией:

$$t_{ign} [\text{мс}] = 8.6 \cdot 10^{-4} d_s^{2.3},$$

где  $d_s$  измеряется в микрометрах. Для частиц диаметром 6 мкм предсказанное время задержки воспламенения составляет 53 мкс.

### Воспламенение облаков частиц алюминия

Ударно-волновое воспламенение облаков частиц алюминия исследовалось в экспериментах в ударной трубе [40, 41]. Данные в «нормальном» режиме воспламенения (значки) коррелируют с моделью воспламенения частиц в пламени бунзеновской горелки [42], а именно:

$$t_* = f_{FM}(T) =$$

$$= \frac{\rho_s d_s^2}{12 \lambda_g(T)} \left( c_s \ln \frac{T - 290}{T - T_*} + \frac{\Delta H}{T - T_m} \right), \quad (\text{A2})$$

где  $\rho_s = 2.7 \text{ г/см}^3$  — плотность Al,  $c_s = 1 \text{ Дж/(г·К)}$  — теплоемкость газа,  $T_m = 933 \text{ К}$  — температура плавления Al,  $\Delta H = 400 \text{ Дж/г}$  — теплота плавления чистого Al,  $T$  — температура газа в отраженной ударной волне,  $T_*$  — температура воспламенения частицы Al,  $\lambda_g(T) = \lambda_0 (T/290)^{3/4}$  — теплопроводность газа при  $\lambda_0 = 2.4 \cdot 10^{-2} \text{ Дж/(м·с·К)}$ . Для нормального режима воспламенения экспериментальные данные согласуются с зависимостью (A2) при  $T_* = 1800 \text{ К}$ .

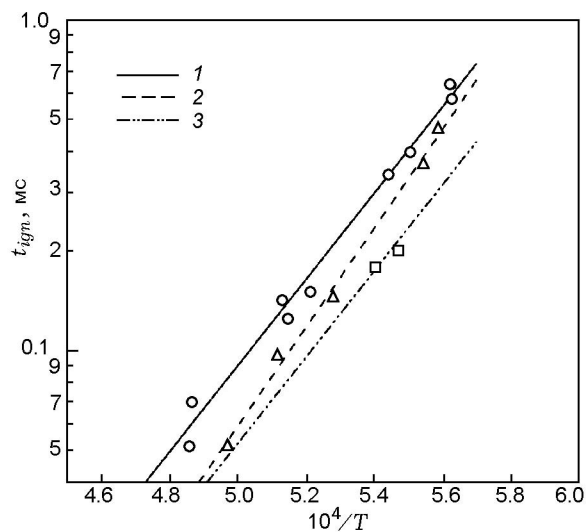


Рис. А2. Измеренные задержки воспламенения [40] в «нормальном» режиме воспламенения ( $T_* \approx 1800 \text{ К}$ ):

линии: 1 —  $t_1 = 2.5 \cdot 10^{-8} \exp(30000/T)$ , 2 —  $t_2 = 0.2 \cdot 10^{-8} \exp(34400/T)$ , 3 —  $t_3 = 1.6 \cdot 10^{-8} \exp(30000/T)$ ; точки: кружок — сферические частицы Al, 3 ÷ 5 мкм; треугольники — сферические частицы Al—Fe, 0 ÷ 20 мкм; квадраты — чешуйки Al, (20 ÷ 30) × (2 ÷ 5) мкм

Также наблюдалось воспламенение частиц Al при температурах значительно ниже 1800 К — вплоть до 1000 К. Эти данные согласуются с измерениями [38] (993 ÷ 1133 К) для частиц Al диаметром  $d_s = 6 \text{ мкм}$  (см. рис. А1). В этих случаях воспламенялась только мелкая фракция частиц Al в облаке, что получило в работе [40] название «аномальное воспламенение». Авторы приписали причину этого явления неконтролируемым свойствам частиц в испытательных образцах, взятых из одной партии порошка Al (например, наличию трещин, изменению толщины оксидного покрытия  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , присутствию ультрамелких частиц и т. д.). Очевидно, одним из условий воспламенения при низкотемпературном режиме является высокая концентрация частиц Al [41].

Для полноты проанализируем данные по задержкам воспламенения в «нормальном» режиме воспламенения ( $T_* = 1800 \text{ К}$ ). Экспериментальные точки показаны в виде зависимости аррениусовского типа на рис. А2. Результаты аппроксимируются показательными функциями от температуры, указанными в подрисуночной подписи. Рассмотрим задержки воспламенения частиц Al:

сферические частицы Al:

$$t_1 = 2.5 \cdot 10^{-8} \exp(30\,000/T) = \\ = 2.5 \cdot 10^{-8} \exp(60\,000/RT),$$

чешуйки Al:

$$t_3 = 1.6 \cdot 10^{-8} \exp(30\,000/T) = \\ = 1.6 \cdot 10^{-8} \exp(60\,000/RT). \quad (A3)$$

Вышеприведенные формулы содержат значение глобальной энергии активации частиц алюминия  $E_a = 60$  ккал/моль. Заметим, что время задержки воспламенения чешуйчатых частиц Al на 60 % меньше, чем время задержки воспламенения сферических частиц Al. Это результат влияния геометрии на воспламенение.

### Модель воспламенения

Данные измерений задержек воспламенения могут быть использованы в качестве базиса для построения модели воспламенения частиц алюминия. Следуя работам [45] и [46] для газозафазных систем, введем  $f(x, t)$  — функцию распределения задержек воспламенения в момент времени  $t$ . Для лагранжевой частицы эта функция удовлетворяет следующему кинетическому уравнению:

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{t_{ign}(T)} = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right).$$

Переходя к эйлеровым координатам, можно получить уравнение

$$\partial_t f + \mathbf{u} \cdot \nabla f = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

с начальным условием  $f(\mathbf{x}, 0) = 0$ . Для чешуйчатых (хлопьевидных) частиц алюминия  $A = 6.25 \cdot 10^7$  и  $E_a = 60$  ккал/моль в соответствии с формулой (A3). Далее можно допустить, что воспламенение в вычислительной ячейке в точке  $\mathbf{x}$  происходит в момент времени  $t$  при  $f(\mathbf{x}, t) \geq 1$ . После воспламенения образование продуктов горения Al в воздухе подчиняется уравнению

$$\partial_t \rho Y_p + \nabla \cdot \rho Y_p \mathbf{u} = (1 + \alpha_s) \dot{s}.$$

Здесь скорость горения  $\mathbf{u}$  определяется скоростью турбулентного перемешивания с воздухом. Применимость этой модели будет исследована в численном моделировании в будущем.

### Заключение

В отличие от газозафазных систем, на воспламенение облаков частиц алюминия влияет взаимодействие механических, физических и химических процессов. Для одиночных частиц Al в неподвижной окружающей среде температура воспламенения в соответствии с моделью [38] зависит от размера частиц и концентрации кислорода (A1), а задержки воспламенения подчиняются модели теплопереноса Фридмана — Мачека (A2). Для подвергнутых воздействию ударных волн облаков частиц Al измеренные температуры воспламенения находятся в интервале  $933 \div 1800$  К; соответствующие задержки воспламенения лежат в диапазоне  $50 \div 1500$  мкс и зависят от неконтролируемых свойств частиц из одной партии порошка алюминия. Такие эксперименты показывают, что хотя облака частиц Al могут воспламеняться при определенных условиях, не вся масса частиц Al сгорает. В этом смысле глобальный расход горючего — величина статистическая, т. е. она определяется параметрами, которые не поддаются контролю в экспериментах. По-видимому, для адекватного описания этого явления необходима статистическая модель воспламенения.

Воспламенение облаков частиц алюминия при взрывах УДГ характеризуется дополнительным уровнем сложности из-за присущей задаче нестационарности. Частицы вовлекаются во взрывную волну, порождаемую взрывом бустерного заряда. Первоначально они могут воспламеняться от горячих продуктов, образующихся при детонации бустерного заряда или при догорании этих продуктов в воздухе. Однако этот тепловой источник подвергается сильным эффектам охлаждения, вызванным расширением взрывной волны. Таким образом, процесс нагрева частиц является существенно нестационарным. С точки зрения развития теплового взрыва их воспламенение определяется соотношением скоростей двух процессов: 1) нестационарного нагрева окружающими газами и за счет тепловыделения при горении алюминия в воздухе, 2) нестационарного охлаждения из-за расширения взрывной волны и захвата холодного воздуха в процессе турбулентного перемешивания. Такие нестационарные эффекты способствуют более раннему воспламенению мелких частиц по сравнению с крупными. В итоге общий результат для всего облака частиц алюминия зависит от совокупного

эффекта взаимодействия всех фракций частиц в облаке. Чтобы решить этот вопрос, требуется разработать нестационарную модель теплового взрыва.

**ПРИЛОЖЕНИЕ В**

**ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ГАЗООБРАЗНЫХ ПРОДУКТОВ ДЕТОНАЦИИ**

Ниже приведены значения теплопроводности ( $\lambda_g$ ) и вязкости ( $\mu$ ) реагентов, продуктов детонации и газообразных продуктов горения при  $T = 0^\circ\text{C}$  и  $p = 1$  атм (исходные данные см. в [47–49]).

Газ	$\lambda_g$ , Вт/(м·К)	$\mu$ , г/(с·см)
Воздух	0.0239	$1.716 \cdot 10^{-4}$
N <sub>2</sub>	0.024	$1.75 \cdot 10^{-4}$
CO	0.023	$1.70 \cdot 10^{-4}$
CO <sub>2</sub>	0.0146	$1.46 \cdot 10^{-4}$
H <sub>2</sub> O <sub>v</sub>	0.0153	$1.27 \cdot 10^{-4}$
H <sub>2</sub>	0.168	$0.83 \cdot 10^{-4}$
Продукты детонации	0.02096	$1.24 \cdot 10^{-4}$ (среднее по молярным долям)
Продукты горения	0.0186	$1.53 \cdot 10^{-4}$ (среднее по молярным долям)

Молярный состав продуктов реакции тэна				
H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>
Продукты детонации, %				
33	31	6	14	4
Продукты горения, %				
26	33	41	0	0

Зависимости от температуры:

$$\lambda_g(T) = \lambda_{g0} \sqrt{T/273}, \quad \mu(T) = \mu_0 \sqrt{T/273}.$$

**ПРИЛОЖЕНИЕ С**

**КОЭФФИЦИЕНТЫ КУСОЧНО-КВАДРАТИЧНЫХ  
ФУНКЦИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ**

Таблица С1

Уравнения состояния воздуха (10 атм)

T, К	$a_A$	$b_A$	$c_A$
300 ÷ 2340	$2.02768 \cdot 10^{-5}$	0.16498	-71.9172
2340 ÷ 3700	$1.34322 \cdot 10^{-4}$	-0.41045	658.24424
3700 ÷ 4150	$7.01281 \cdot 10^{-5}$	0.11507	-403.36139
4150 ÷ 4530	$-1.02084 \cdot 10^{-4}$	1.53731	-3340.674
4530 ÷ 6000	$4.04923 \cdot 10^{-5}$	0.11381	198.38643

Таблица С2

Уравнения состояния продуктов взрыва тэна  
(изоэнтропа Чепмена — Жуге)

T, К	$a_{F_1}$	$b_{F_1}$	$c_{F_1}$
300 ÷ 2340	$3.31674 \cdot 10^{-5}$	0.20867	-1890.164
2340 ÷ 3700	$5.97088 \cdot 10^{-5}$	0.0377	-1634.868
3700 ÷ 4150	$1.9052 \cdot 10^{-4}$	-0.89226	20.04935
4150 ÷ 4530	$2.28177 \cdot 10^{-4}$	-1.20053	651.0422
4530 ÷ 6000	$1.78281 \cdot 10^{-4}$	-0.774255	-248.616

Таблица С3

Уравнения состояния продуктов горения тэна  
в воздухе (10 атм)

T, К	$a_{P_1}$	$b_{P_1}$	$c_{P_1}$
300 ÷ 2340	$4.745 \cdot 10^{-5}$	0.1549	-1555.6
2340 ÷ 3700	$4.6038 \cdot 10^{-4}$	-1.7722	711.74
3700 ÷ 4150	$4.9083 \cdot 10^{-4}$	-1.841	558.87
4150 ÷ 4530	$-6.1549 \cdot 10^{-4}$	7.3463	-18515.0
4530 ÷ 6000	$-2.8216 \cdot 10^{-4}$	3.8022	-9254.5

Таблица С4

Уравнения состояния инертного Al

T, К	$a_{Al}$	$b_{Al}$	$c_{Al}$
300 ÷ 6000	0	0.28128	-8.3895



Таблица С5  
Уравнения состояния продуктов горения Al  
в воздухе (10 атм)

$T, K$	$a_{P_2}$	$b_{P_2}$	$c_{P_2}$
300 ÷ 2340	$1.76153 \cdot 10^{-5}$	0.20186	-1553.62
2340 ÷ 3700	$1.49115 \cdot 10^{-5}$	0.2502	-1554.5182
3700 ÷ 4150	0.00113	-7.95255	13553.8
4150 ÷ 4530	0.00826	-67.29752	137084.51
4530 ÷ 6000	$5.03544 \cdot 10^{-5}$	-0.07059	1216.0279

Таблица С6  
Молекулярная масса компонентов

Компонент	Условия	Молекулярная масса, г/моль
Воздух	$p = 10$ атм, $T < 3000$ К	28.85
Продукты детонации тэна	Изоэнтропа $T = 1800$ К	28.76
Продукты горения тэна в воздухе ( $\sigma_s = 0.482$ )	$p = 10$ атм, $T_a = 3200$ К	27.75
Продукты горения Al в воздухе ( $\sigma_s = 4.03$ )	$p = 10$ атм, $T_a = 4120$ К	40.78

## ЛИТЕРАТУРА

- Kuhl A. L. Barometric Calorimeters // J. Phys. Chem. B. — 2010. — V. 29, N 3. — P. 1–8.
- Kuhl A. L., Reichenbach H. Combustion effects in confined explosions // Proc. Combust. Inst. — 2009. — V. 32. — P. 2291–2298.
- Neuwald P., Reichenbach H., Kuhl A. L. Shock-dispersed fuel charges-combustion in chambers and tunnels // Energetic Materials: Structure and Properties: 35th Intern. Annu. Conf. of the Institut Chimische Technologie (ICT). — 2003. — P. 13.1–13.14.
- Neuwald P., Reichenbach H., Kuhl A. L. Shock-dispersed flake aluminum-performance in environments of different geometries // Energetic Materials: Performance and Safety: 36th Intern. Annu. Conf. of the Institut Chimische Technologie (ICT). — 2005. — P. 71.1–71.12.
- Neuwald P., Reichenbach H., Kuhl A. L. Combustion of shock-dispersed-flake aluminum-high-speed visualization // Energetic Materials: Insensitivity, Ageing, Monitoring: 37th Intern. Annu. Conf. of the Institut Chimische Technologie (ICT). — 2006. — P. 116.1–116.12.
- Reichenbach H., Neuwald P., Kuhl A. L. Waveforms measured in confined thermoatmic explosions // Energetic Materials: Characterisation and Performance of Advanced Systems: 38th Intern. Annu. Conf. of the Institut Chimische Technologie (ICT). — 2007. — P. 3.1–3.11.
- Кул А. Л., Нойвальд П., Рейкенбах Н. Эффективность горения ударно-диспергируемого горючего в калометрических сосудах различной емкости // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 6. — С. 121–125.
- Кул А. Л. Термодинамика продуктов горения ТНТ в камере // Хим. физика. — 2006. — Т. 25, № 10. — С. 42–48.
- Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. — М.: Наука, 1987. — Т. 1.
- Kuhl A. L., Bell J. B., Beckner V. E., Khasainov B. Numerical simulations of thermoatmic explosions // Energetic Materials: Characterization and Performance of Advanced Systems: 38th Intern. Annu. Conf. of Institut Chimische Technologie (ICT). — 2007. — P. 1.1–1.14.
- Bell J. B., Kuhl A. L., Beckner V. E. Simulation of enhanced-explosive devices in chambers and tunnels // HPCMP Users Group Conf. — 2007. — 0-7695-3088-5/07, IEEE.
- Khasainov B., Kuhl A. L., Victorov S., Neuwald P. Model of non-premixed combustion of Al-air mixtures // 14th APS Meeting on Shock Compression Condensed in Matter. — 2005. — P. 449–452. (AIP Proc.; V. 845, pt 1.)
- Ingignoli W. Etude de la formation et de la propagation des détonations dans des suspensions de particules d'aluminium en atmosphère oxydante ou réactive: Thèse d'Université de Poitiers, France. — 1999.
- Veysiére B., Khasainov B. A Model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension // Combust. and Flame. — V. 85 (1, 2). — 1991. — P. 241–253.
- Kobiera A., Szymczyk J., Wolanski P., Kuhl A. L. Study of the shock-induced acceleration of hexane droplets // Shock Waves. — 2009. — V. 18, N 6. — P. 475.
- Kuhl A. L., Khasainov B. Quadratic model of thermodynamic states in SDF explosions // Energetic Materials: Characterization and Performance of Advanced Systems: 38th Intern. Annu. Conf. of the Institut Chimische Technologie (ICT). — 2007. — P. 143.1–143.11.
- Jones J. B., Hawkins G. A. Engineering Thermodynamics: An Introductory Textbook. — New York: Wiley, 1960. — P. 405.
- Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme V: a second-order sequel to Godunov's methods // J. Comp. Phys. — 1979. — V. 32. — P. 101–136.
- Colella P., Glaz H. M. Efficient solution algorithms for the riemann problem for real gases // J. Comp. Phys. — 1985. — V. 59. — P. 264–289.

20. **Colella P., Woodward P. R.** The piecewise parabolic method (PPM) for gasdynamical simulations // *J. Comp. Phys.* — 1984. — V. 54. — P. 174–201.
21. **Bell J. B., Colella P., Trangenstein J. A.** Higher order godunov methods for general systems of hyperbolic conservation laws // *J. Comp. Phys.* — 1989. — V. 82, N 2. — P. 362–397.
22. **Colella P.** Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation laws // *J. Comp. Phys.* — 1990. — V. 87. — P. 171–200.
23. **Collins P., Ferguson R. E., Chien K.-Y., Kuhl A. L., Krispin J., Glaz H. M.** Simulation of shock-induced dusty gas flows using various models // *AIAA Fluid Dynamics Conf.*, 1994. — AIAA 94-2309.
24. **Berger J. M., Oliger J.** Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations // *J. Comp. Phys.* — 1984. — V. 53. — P. 484–512.
25. **Berger M. J., Colella P.** Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics // *J. Comp. Phys.* — 1989. — V. 82, N 1. — P. 64–84.
26. **Bell J., Berger J. M., Saltzman J., Welcome M.** A three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws // *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* — 1994. — V. 15, N 1. — P. 127–138.
27. **Pember R. B., Bell J. B., Colella P., Crutchfield W. Y., Welcome M. L.** An Adaptive cartesian grid method for unsteady compressible flow in complex geometries // *J. Comp. Phys.* — 1995. — V. 120, N 2. — P. 278–304.
28. **Crutchfield W. Y., Welcome M. L.** Object-oriented implementation of adaptive mesh refinement algorithms // *Scient. Programming.* — 1993. — V. 2. — P. 145–156.
29. **Rendleman C. A., Beckner V. E., Lijewski M., Crutchfield W. Y., Bell J. B.** Parallelization of structured, hierarchical adaptive mesh refinement algorithms // *Computing and Visualization in Sci.* — 2000. — V. 3.
30. **Boris J. P.** On large eddy simulations using sub-grid turbulence models // *Wither Turbulence? Turbulence at the Crossroads* / J. L. Lumley (Ed.). — Berlin: Springer-Verlag, 1990. — P. 344–353. — (Lect. Notes in Phys.).
31. **Boris J. P., Grinstein F. F., Oran E. S., Kolbe R. L.** New insights into large eddy simulation // *Fluid Dynamics Research.* — 1992. — V. 10. — P. 199–228.
32. **Oran E. S., Boris J. P.** Numerical Simulation of Reactive Flow. — 2nd ed. — Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2001. — P. 473–487.
33. **Implicit Large-Eddy Simulation: Computing Turbulent Fluid Dynamics** / F. F. Grinstein, L. G. Margolin, W. J. Rider (Eds.). — Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2007.
34. **Aspden A. J., Nikiforakis N., Dalziel S. B., Bell J. B.** Analysis of implicit LES methods // *Comm. Appl. Math. and Comput. Sci.* — 2008. — V. 3. — P. 103–126.
35. **Bell J. B., Marcus D. L.** Vorticity intensification and transition to turbulence in the three-dimensional Euler equations // *Comm. Math. Phys.* — 1992. — V. 147. — P. 371–394.
36. **Chien K.-Y., Ferguson R. E., Kuhl A. L., Glaz H. M., Colella P.** Inviscid dynamics of two-dimensional shear layers // *Comp. Fluid Dynamics.* — 1995. — V. 5. — P. 59–80.
37. **Kuhl A. L.** Spherical mixing layers in explosions // *Dynamics of Exothermicity* / J. R. Bowen (Ed.). — Gordon and Breach, 1996. — P. 290–320.
38. **Гуревич М. А., Лапкина К. И., Озеров Е. С.** Предельные условия воспламенения частицы алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 1970. — Т. 6, № 2. — С. 172–175.
39. **Федоров А. В., Харламова Ю. В.** Воспламенение частицы алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2003. — Т. 39, № 5. — С. 65–68.
40. **Бойко В. М., Лотов В. В., Папырин А. Н.** Воспламенение газозвесей металлических порошков в отраженных УВ // *Физика горения и взрыва.* — 1989. — Т. 25, № 2. — С. 67–74.
41. **Boiko V. M., Poplavski S. V.** Self-ignition and ignition of Al powders in shock waves // *Shock Waves.* — 2002. — V. 11. — P. 289–295.
42. **Friedman R., Maček A.** Ignition and combustion of aluminum particles in hot ambient gases // *Combust. and Flame.* — 1962. — V. 6. — P. 9–19.
43. **Merzhanov A. G.** Thermal theory of metal particle ignition // *AIAA Journal.* — 1975. — V. 13, N 2. — P. 209–214.
44. **Похил П. Ф., Беляев А. Ф., Фролов Ю. В., Логачев В. С., Коротков А. И.** Горение порошкообразных металлов в активных средах. — М.: Наука, 1972.
45. **Korobeinikov V. P., Levin V. A., Markov V. V., Chernyi G. G.** Propagation of blast waves in a combustible gas // *Astronaut. Acta.* — 1972. — V. 17. — P. 529–537.
46. **Oran E. S., Boris J. P., Young T. R., Flanagan M., Picone M.** Simulation of gas phase detonations: introduction of an induction parameter model // *NRL Memorandum Report 4255.* — 1980.
47. **Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N.** *Transport Phenomena.* — New York: John Wiley, 1960.
48. **Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B.** *Molecular Theory of Liquids & Gases.* — New York: John Wiley, 1954.
49. **Handbook of Chemistry & Physics.** — 39th ed. / C. D. Hodgman, R. C. Weast, S. M Selby (Eds.). — Cleveland, Ohio: Chemical Rubber Publ., 1958.

*Поступила в редакцию 24/X 2008 г.,  
в окончательном варианте — 15/IX 2009 г.*