

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ОБЛАКА МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ\*

А. Д. РЫЧКОВ

*Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: rych@ict.nsc.ru

Н. Ю. ШОКИНА

*High Performance Computing Center, Stuttgart, Germany*

e-mail: shokina@hlrs.de

The investigation of processes of generation and propagation of a cloud of fine-dispersed aluminium particles is done with the help of numerical modelling. A cloud is generated using a special device under the influence of high-temperature combustion products of a solid-propellant gas generator. The ignition conditions for particles are also investigated. The numerical modelling results have shown the dynamic characteristics of a particle cloud and the ignition of particles depend on a temperature of a gas generator combustion products, sizes of particles and energetic characteristics of a gas generator. The obtained results are qualitatively consistent with the results of experiments, which have been done in the Fraunhofer Institute for Chemical Technologies (Pfinztal, Germany).

## Введение

Схема устройства для быстрого распыления мелкодисперсных частиц показана на рис. 1, а. Она представляет собой цилиндр, центральная часть которого (газогенератор) заполнена гранулами твердого унитарного топлива сферической формы диаметром несколько миллиметров. Остальная (периферийная) часть цилиндра содержит насыпной распыляемый мелкодисперсный порошок алюминия, который моделировался полидисперсной средой, состоящей из сферических частиц. Между газогенератором и насыпным материалом размещается металлическая сетка, не оказывающая заметного гидродинамического сопротивления движению продуктов сгорания в газогенераторе. Верхняя и нижняя крышки цилиндра считались непроницаемыми и неподвижными, так что движение частиц в цилиндре после воспламенения топливных гранул под воздействием газообразных высокотемпературных продуктов сгорания высокого давления происходило только в радиальном направлении.

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-08-01202), программы фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН (проект 3.1) и Президентской программы “Ведущие научные школы РФ” (грант № НШ-9886.2006.9).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2006.

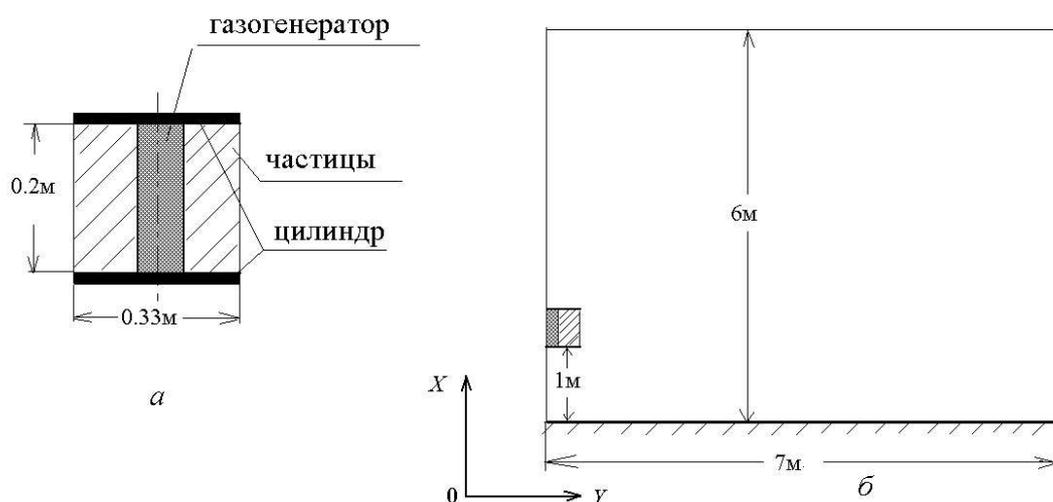


Рис. 1. Схема устройства.

Процесс компактирования (уплотнения) частиц под нестационарным воздействием давления продуктов сгорания достаточно сложен, и его исследование представляет собой самостоятельную задачу [1]. Поэтому на данном этапе моделирования предполагалось, что движение насыпной среды между крышками цилиндра происходит в режиме “пробочного” пневмотранспорта с предельно допустимой пористостью для сферических частиц, равной 0.42. После выхода левой границы “пробки” из цилиндра начинался процесс ее разрушения и формирования облака частиц под воздействием истекающих высокотемпературных продуктов сгорания, а также их воспламенения и горения.

## 1. Описание модели и основные уравнения

Продукты сгорания топливных гранул в момент выхода “пробки” насыпного материала из цилиндра имеют давление 10...15 МПа, истечение в окружающую среду происходит в сверхзвуковом режиме, и при описании движения гранул необходимо учитывать турбулентный характер течения. Поэтому в данной работе для моделирования процессов формирования и движения облака мелкодисперсных частиц использовалась осредненная по Фавру система уравнений Навье — Стокса, замыкаемая  $q-\omega$ -й моделью турбулентности [2]. Описание движения полидисперсной второй фазы проводилось в рамках стохастического подхода [3], учитывающего влияние турбулентной природы поля течения несущего газа на движение частиц.

При описании математической модели рассматриваемых процессов приняты следующие допущения.

1. Течение является турбулентным, двухфазным, осесимметричным и нестационарным. Истечение происходит в неподвижную атмосферу стандартного состава.

2. Продукты сгорания газогенератора состоят из нереагирующей смеси инертной компоненты и окислителя, окислительный потенциал которого моделировался некоторой весовой долей кислорода  $\beta$ .

3. Вторая фаза состоит из полидисперсных частиц алюминия сферической формы и представляет собой  $N$  фракций, внутри каждой из которых частицы имеют одинаковый

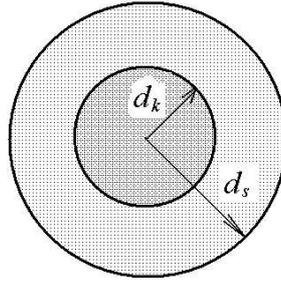


Рис. 2. Модель горения частицы.

размер. Столкновениями между частицами на данном этапе моделирования пренебрегается.

4. Распределение температуры частицы по ее объему полагается однородным.

5. Газоприток от гранул твердого топлива моделировался источниковыми членами в уравнениях сохранения массы и энергии.

Для описания процесса горения частиц алюминия используется модель сжимающегося металлического ядра диаметром  $d_{i,k}$  и оксидной оболочки диаметром  $d_{i,s}$ . Схема такой модели показана на рис. 2.

Полагается, что горение  $i$ -й частицы описывается одностадийной брутто-реакцией  $\text{Al} + 3/4\text{O}_2 = 1/2\text{Al}_2\text{O}_3$ , линейная скорость которой определяется по формуле [4]

$$\frac{d(d_{i,k})}{dt} = -\frac{10^{-3} \cdot Y_{\text{O}_2} (p \cdot 10^{-5})^{0.1} T^{0.2}}{0.00735 \cdot (d_{i0} \cdot 10^6)^{0.8}},$$

где  $d_{i0}$  — начальный диаметр частицы;  $Y_{\text{O}_2}$  — массовая доля окислителя;  $p$ ,  $T$  — давление и температура. Уменьшение массы ядра частицы в процессе ее горения описывается зависимостью

$$\frac{dm_i^{(\text{Al})}}{dt} = \rho_{\text{Al}} d_{i,k}^2 \frac{\pi}{2} \frac{d(d_{i,k})}{dt}.$$

Масса оксидной оболочки, с одной стороны, увеличивается за счет образования окисла в процессе горения, а с другой — может уменьшаться за счет уноса  $\text{Al}_2\text{O}_3$  с поверхности оболочки в виде субмикронных частиц, поэтому изменение массы оксидной оболочки описывалось следующей формулой:

$$\frac{dm_i^{(\text{Al}_2\text{O}_3)}}{dt} = -\frac{dm_i^{(\text{Al})}}{dt} \left(1 + \frac{3 M_{\text{O}_2}}{4 M_{\text{Al}}} - \alpha\right),$$

где  $\alpha$  — эмпирический коэффициент, учитывающий процесс уноса окисла с поверхности оболочки. Полагается, что субмикронные частицы находятся в локальном равновесии с несущим газом, поэтому их масса добавляется к инертной компоненте продуктов сгорания газогенератора, а энергия — к полной энергии несущего газа. Далее полагается, что горение частицы алюминия начинается при достижении температуры частицы определенной величины — температуры воспламенения  $T_{ig}$ .

Система уравнений, описывающая такое течение, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = M_{\text{gen}} + \left(\frac{3 M_{\text{O}_2}}{4 M_{\text{Al}}} - \alpha\right) \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{dm_i^{\text{Al}}}{dt} \right\rangle n_i; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{O_2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u Y_{O_2} + q_{x,O_2}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho v Y_{O_2} + q_{r,O_2}) = \frac{3M_{O_2}}{4M_{Al}} \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{dm_i^{Al}}{dt} \right\rangle n_i + \beta M_{gen}; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{N_2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u Y_{N_2} + q_{x,N_2}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho v Y_{N_2} + q_{r,N_2}) = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_M}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u Y_M + q_{x,M}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho v Y_M + q_{r,M}) = -\alpha \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{dm_i^{Al}}{dt} \right\rangle n_i + (1 - \beta) M_{gen}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p + \tau_{xx}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho u v + \tau_{xr}) = - \sum_{i=1}^N n_i \left\langle m_{p,i} \frac{du_i}{dt} \right\rangle; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v u + \tau_{rx}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho v^2 + p + \tau_{rr}) = p - \sum_{i=1}^N n_i \left\langle m_{p,i} \frac{dv_i}{dt} \right\rangle; \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u(\rho E + p) + u\tau_{xx} + v\tau_{xr} + \varphi_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(v(\rho E + p) + u\tau_{xr} + v\tau_{rr} + \varphi_r) = \\ = - \sum_{i=1}^N n_i \left[ u \left\langle m_{p,i} \frac{du_i}{dt} \right\rangle + v \left\langle m_{p,i} \frac{dv_i}{dt} \right\rangle + \left\langle \pi d_{p,i} \lambda \cdot \text{Nu} (T - T_i) \right\rangle - \right. \\ \left. - \alpha \left\langle \frac{dm_i^{Al}}{dt} C_i (T - T_i) \right\rangle - \left\langle \frac{dm_i^{Al}}{dt} \right\rangle Q_p \right] + Q_{gen} M_{gen}; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u q + \tau_{x,q}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho u q + \tau_{r,q}) = S_q; \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \omega + \tau_{x,\omega}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r(\rho u \omega + \tau_{r,\omega}) = S_\omega; \quad (9)$$

$$p = \rho T R_0 \left( \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + \frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}} + \frac{Y_M}{M_M} \right). \quad (10)$$

Уравнения движения  $i$ -й частицы вдоль ее траектории записывались в виде

$$\frac{dm_i^{Al}}{dt} = -\rho_{Al} d_{i,k}^2 \frac{\pi}{2} \cdot N_i \frac{10^{-3} \cdot Y_{O_2} (p \cdot 10^{-5})^{0.1} T^{0.2}}{A(d_{i,o} \cdot 10^6)^{n-1}}; \quad (11)$$

$$\frac{dm_i^{Al_2O_3}}{dt} = - \left( \frac{M_{Al_2O_3}}{2 \cdot M_{Al}} - \alpha \right) \frac{dm_i^{Al}}{dt}; \quad (12)$$

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{3}{4} \frac{\mu C_{Di} \text{Re}_{p,i}}{\rho_{i,p} d_{i,s}^2} (u + u' - u_i); \quad (13)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{3}{4} \frac{\mu C_{Di} \text{Re}_{p,i}}{\rho_{i,p} d_{i,s}^2} (v + v' - v_i); \quad (14)$$

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{6}{C_i} \frac{\lambda \cdot \text{Nu}}{\rho_{p,i} d_{i,s}^2} (T - T_i); \quad (15)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i; \quad (16)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = v_i. \quad (17)$$

Здесь  $q = \sqrt{k}$ ,  $\omega = \varepsilon/k$  — “турбулентные” переменные, связанные с кинетической энергией турбулентности  $k$  и со скоростью ее диссипации  $\varepsilon$ ;  $E = C_v T + (u^2 + v^2)/2$  — полная удельная энергия;  $H = E + p/\rho$  — удельная энтальпия;  $\mu$  и  $\mu_t$  — молекулярная и турбулентная вязкости соответственно;  $p$ ,  $T$  — статическое давление и температура,  $R_0$  — универсальная газовая постоянная;  $Y_{O_2}$ ,  $Y_{N_2}$ ,  $Y_M$ ,  $M_{O_2}$ ,  $M_{N_2}$ ,  $M_M$  — массовые доли и молекулярные веса кислорода, азота и инертной компоненты; величины  $M_{\text{gen}}$  и  $Q_{\text{gen}}$  есть источники массы и энергии, моделирующие приход высокотемпературных продуктов сгорания от газогенератора;  $Re_{p,i}$  — число Рейнольдса;

$$S_q = C_{q1} (C_\mu S/\omega^2 - 2D/(3\omega) - 1) \rho \omega q,$$

$$S_\omega = [C_{\omega 1}(C_\mu S/\omega^2 - C_{\omega 3} D/\omega) - C_{\omega 2}] \rho \omega^2,$$

$$S = (u_{i,j} + u_{j,i})u_{i,j} - 2/3 u_{k,k}^2.$$

Константы, входящие в описание модели турбулентности, имели следующие значения:  $C_{\omega 1} = 0.55$ ,  $C_{\omega 2} = 0.833$ ,  $C_{\omega 3} = 0.666$ ,  $C_\mu = 0.09$ ,  $C_{q1} = 0.5$ .

$$\tau_{rx} = \tau_{xr} = \mu_e \left( \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \phi_x = -\lambda_e \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \phi_r = -\lambda_e \frac{\partial T}{\partial r},$$

$$\mu_t = C_\mu \rho q^2 / \omega, \quad \mu_e = \mu + \mu_t, \quad \lambda_e = \lambda + \lambda_t, \quad \lambda_t = \mu_t C_p / Pr_t,$$

$$D = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial rv}{\partial r}, \quad q_{x,k} = - \left( \rho D_k + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial x}, \quad q_{r,k} = - \left( \rho D_k + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial r},$$

$$k = O_2, N_2, M,$$

$Pr_t$  — турбулентное число Прандтля.

Члены в угловых скобках означают осреднение по объему ячейки разностной сетки;  $n_i$  — концентрация частиц  $i$ -й фракции в ячейке в данный момент времени.

$$C_{Di} = \begin{cases} \frac{24}{Re_{pi}} \left( 1 + \frac{Re_{pi}^{2/3}}{6} \right) & \text{при } Re_{pi} \leq 10^3, \\ 0.44 & \text{при } Re_{pi} > 10^3, \end{cases}$$

$$Re_{pi} = \frac{d_{i,s} \rho |\mathbf{V} - \mathbf{V}_i|}{\mu},$$

где  $u'$ ,  $v'$  — компоненты случайного вектора возмущения скорости газа  $\mathbf{v}' = (u', v') = \sqrt{2k/3} \operatorname{erfc}^{-1}(N_r) \mathbf{V}/|\mathbf{V}|$ ,  $\mathbf{V}$  — вектор осредненной скорости;  $N_r$  — случайное число из диапазона  $[-1, +1]$ ;  $\operatorname{erfc}^{-1}$  — обратная функция ошибок;  $C_i$  — удельная теплоемкость  $i$ -й частицы;  $x_i$ ,  $y_i$  — ее координаты.

Диаметр оболочки  $d_{i,s}$  окисла алюминия каждой  $i$ -й частицы определялся из равенства

$$m_i^{\text{Al}} + m_i^{\text{Al}_2\text{O}_3} = \frac{\pi}{6} [d_{i,k}^3 \rho_{\text{Al}} + (d_{i,s}^3 - d_{i,k}^3) \rho_{\text{Al}_2\text{O}_3}].$$

Средняя плотность частицы

$$\rho_{i,p} = \frac{6(m_i^{\text{Al}} + m_i^{\text{Al}_2\text{O}_3})}{\pi d_{i,s}^3}.$$

Для расчета течения несущего газа применялась противопотоковая LU разностная схема второго порядка точности, обладающая TVD-свойствами, близкая к схеме из работы [5]. Расчет движения частиц проводился с помощью A-устойчивой разностной схемы также второго порядка точности [6]. Область решения системы уравнений (1)–(17) и ее размеры в метрах показаны на рис. 1, б, где ось  $OY$  направлена горизонтально, ось  $OX$  — вертикально. Снизу область либо ограничена подстилающей поверхностью (распыление вблизи поверхности Земли), либо не ограничивалась ничем (распыление в безграничном пространстве). Граничные условия для несущего газа задавались следующим образом. На оси  $OX$  принимались условия симметрии течения, на поверхностях крышек цилиндра и на подстилающей поверхности — условия непротекания, на остальных границах — неотражающие граничные условия. Для частиц на подстилающей поверхности задавались условия неупругого отражения:

$$V_{pi,n}^- = -(0.993 - 1.76\Theta + 1.56\Theta^2 - 0.49\Theta^3)V_{pi,n}^+,$$

$$V_{pi,\tau}^- = \frac{5}{7}V_{pi,\tau}^+,$$

где  $V_{pi,n}^+$ ,  $V_{pi,n}^-$ ,  $V_{pi,\tau}^+$ ,  $V_{pi,\tau}^-$  — нормальные и тангенциальные скорости  $i$ -й частицы до (+) падения и после (–) ее отражения;  $\Theta$  — угол падения. Начальным условием для газа и частиц являлось неподвижное состояние.

Величина массоприхода  $M_{gen}$  продуктов сгорания газогенератора в (2), (4), (7) определялась из решения уравнения

$$\frac{dM_{gen}}{dt} = -\rho_{gr} S r_{bg} N_{gg}^0,$$

где  $\rho_{gr}$ ,  $S$ ,  $r_{bg}$  — плотность материала топливной гранулы, ее текущая поверхность и скорость горения;  $N_{gg}^0$  — число гранул в единице объема заряда твердого топлива, которое остается постоянным в процессе их горения и определяется из начальных условий.

## 2. Некоторые результаты расчетов

Расчеты проводились при следующих исходных условиях: масса мелкодисперсных частиц алюминия 2 кг; заряд твердого топлива газогенератора 0.2 кг; скорость горения гранул  $r_{bg} = 5(p/p_0)^{0.6}$  мм/с; теплотворность топлива  $Q_{gen} = 1780$  кДж/кг. Число фракций частиц равнялось пяти, температура воспламенения частицы алюминия  $T_{ig} = 1300$  К.

На рис. 3 показано изменение во времени суммарного тепловыделения от горящих частиц алюминия  $Q$ . Цифры относятся к среднемассовым размерам частиц  $d_{43} = 0.8, 1.3$  и 28 мкм. Сплошными линиями обозначены результаты расчетов при наличии окислителя в продуктах сгорания ( $\beta = 0.2$ ), штриховые — при его отсутствии ( $\beta = 0$ ). Видно, что наличие окислителя способствует более раннему воспламенению частиц алюминия и увеличивает полноту его сгорания. Для частиц с  $d_{43} = 0.8$  мкм полнота сгорания составила 24.5 и 9.2 %, для  $d_{43} = 1.3$  мкм — 2.9 и 2.3 % и для  $d_{43} = 28$  мкм — 0.25 и 0.23 % соответственно.

Расчеты показали, что структура течения при обтекании несущим газом формирующегося облака частиц достаточно сложна и в значительной мере определяется интенсивностью межфазного взаимодействия и тепловыделением от горящих частиц. На рис. 4–6 приведены изотермы поля течения в момент времени  $t = 5$  мс для трех указанных выше

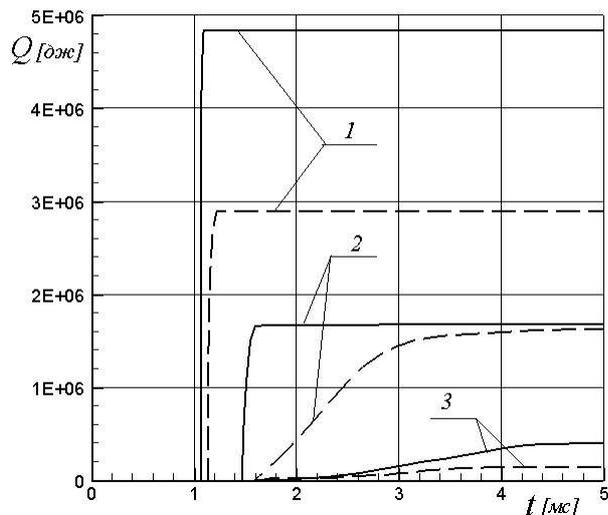
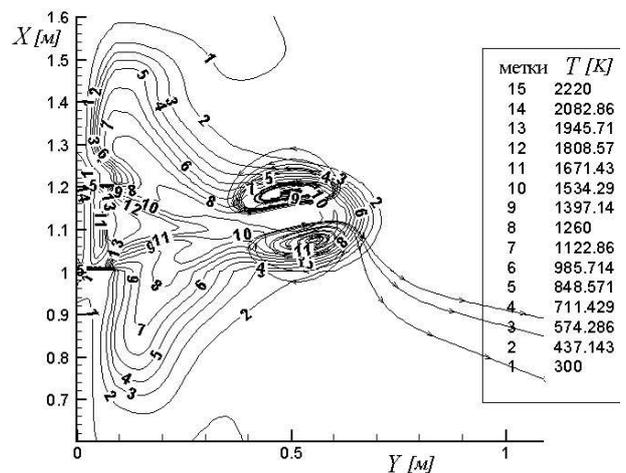
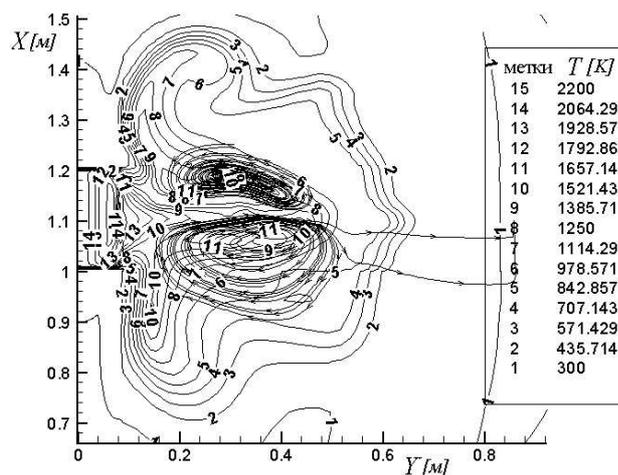
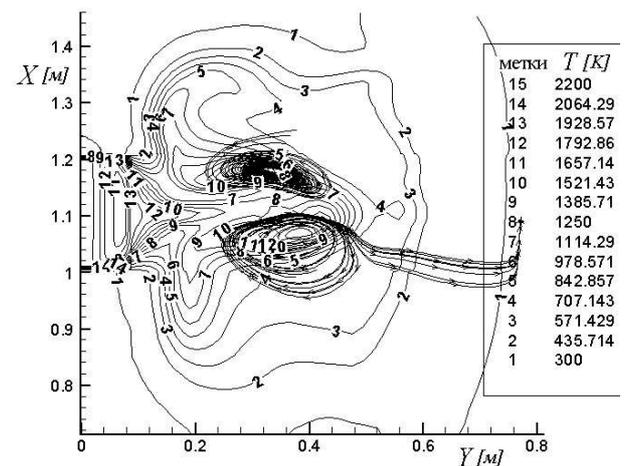


Рис. 3. Тепловыделение от горящих частиц.

Рис. 4. Изотермы поля течения для частиц с  $d_{43} = 0.8$  мкм.Рис. 5. Изотермы поля течения для частиц с  $d_{43} = 1.3$  мкм.Рис. 6. Изотермы поля течения для частиц с  $d_{43} = 28$  мкм.

среднемассовых размеров частиц. Показаны также мгновенные траектории частиц газа, дающие представление о вихревой структуре течения.

Видно, что для частиц малых размеров, полнота сгорания которых достаточно высокая (см. рис. 4), головная часть истекающей струи имеет высокую температуру, в то время как в случае крупных частиц происходят более быстрый “развал” струи и ее менее интенсивное проникновение в окружающую среду. На рис. 7 приведено распределение давления  $P$  и температуры  $T$  по оси  $OY$  при  $x = 1.1$  м для тех же вариантов течения, по которым можно судить о волновой картине процесса истечения. Для мелких частиц (рис. 7, а и б) имеют место интенсивный рост давления за волной разрежения из-за интенсивного торможения газа частицами и последующие его интенсивные колебания, индуцирующие возвратные вихревые течения. При этом уровень максимального пика давления даже на расстоянии одного метра остается относительно безопасным для человеческого организма. В случае

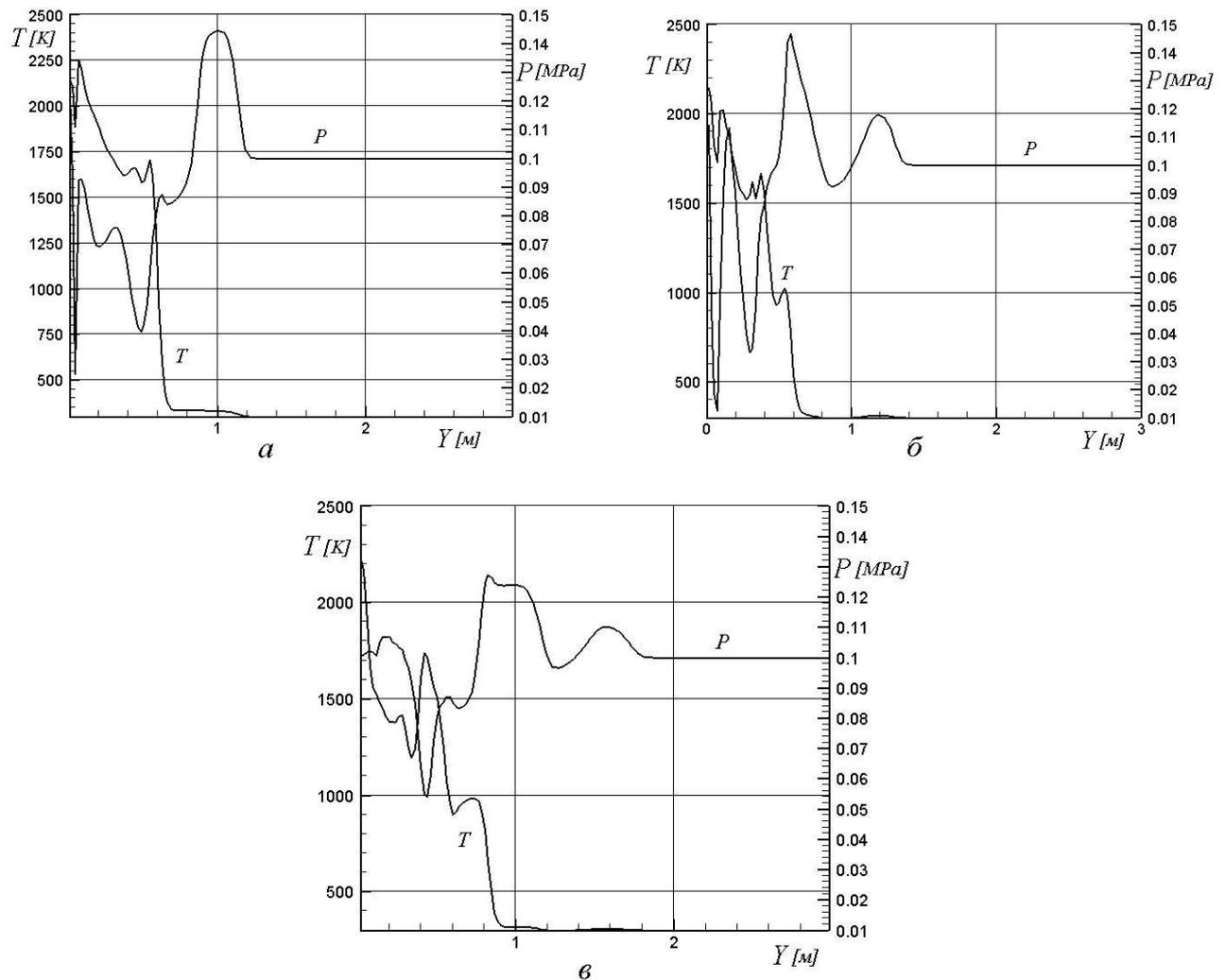


Рис. 7. Распределение давления  $P$  и температуры  $T$  по оси  $OY$ :  $a$  — при  $d_{43} = 0.8$  мкм,  $б$  — при  $d_{43} = 1.3$  мкм,  $в$  — при  $d_{43} = 28$  мкм.

крупных частиц, силовое взаимодействие которых с несущим газом слабое, пик давления ниже.

Результаты расчетов сравнивались с данными физических экспериментов, проведенных для сегмента (четверть цилиндра) такого устройства. Количественные сравнения в таком эксперименте провести невозможно в силу бокового взаимодействия истекающей струи с окружающей средой, однако качественное совпадение по динамике процесса формирования и распространения облака частиц оказалось удовлетворительным [7].

## Список литературы

- [1] DULLIEN F.A. Porous media transport and pore structure. N.Y.: Acad. Press, 1979.
- [2] COAKLEY T.J. Turbulence modeling for high speed flows // AIAA Paper. 1992. P. 92–0436.
- [3] CROW C.T. Review — numerical models for dilute gas-particles flows // Trans. of ASME J. of Fluid Eng. 1982. Vol. 104. P. 297–303.

- [4] БЭКСТЕД М.В. Анализ данных по временам горения частиц алюминия // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 5. С. 55–69.
- [5] YOON S., JAMESON A. An LU-SSOR scheme for the Euler and Navier — Stokes equations // AIAA Paper. 1987. Vol. 87 P. 600.
- [6] РЫЧКОВ А.Д. Математическое моделирование газодинамических процессов в каналах и соплах. Новосибирск: Наука, 1988. 222 с.
- [7] RYCHKOV A.D., SCHNEIDER H., SHOKINA N. JU., EISENREICH N. Numerical and experimental investigation of the gas-dynamic aspect in the dispersal process of  $\mu m$ -sized energetic particles // Proc. of the 33rd Intern. Annual Conf. of ICT “Energetic Materials — Synthesis, Production and Application”. Karlsruhe, Germany, 2002. P. 140.1–140.12.

*Поступила в редакцию 4 апреля 2006 г.*