

УДК: 536.46+662.61

DOI 10.17223/19988621/53/9

А.Ю. Крайнов, В.А. Порязов, К.М. Монсеева

**СКОРОСТЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В АЭРОВЗВЕСИ
НАНОРАЗМЕРНОГО ПОРОШКА АЛЮМИНИЯ¹**

Представлена математическая модель горения аэровзвеси нанодисперсного порошка алюминия. Особенностью модели является то, что для моделирования горения наночастиц алюминия используется локальная математическая модель диффузии окислителя через слой оксида алюминия на поверхности частицы с учетом его реакции с алюминием. Из решения локальных задач горения наночастиц алюминия для всей совокупности частиц аэровзвеси определяется скорость окисления наночастиц алюминия и связанная с ней скорость тепловыделения. Параметры состояния аэровзвеси наночастиц алюминия в воздухе определяются из решения системы уравнений сохранения энергии газа, частиц и сохранения массы компонентов газодисперсной смеси. Разработанная модель не требует задания температуры зажигания наночастиц алюминия. Определены зависимости скорости распространения фронта горения от массовой концентрации нанодисперсного порошка алюминия в воздухе и от начальной температуры аэровзвеси.

Ключевые слова: *аэровзесь нанодисперсного алюминия, скорость горения, процессы в газовой фазе, математическое моделирование.*

Нанопорошки алюминия, получаемые электровзрывом металлических проволок, являются химически активными, так как на их поверхности нет пленки оксида [1], и требуют специальных условий хранения. При образовании оксидной пленки на поверхности наночастиц нанопорошки алюминия могут храниться на воздухе, но остаются пожароопасными [2]. Аэровзесь таких частиц является горючей, и представляется необходимым исследование режимов распространения пламени по аэровзвеси. В частности, задача распространения пламени по порошку алюминия решалась авторами [3, 4].

В [3] представлены математические модели и экспериментальные данные о скорости распространения пламени в аэровзвеси порошков алюминия микронных размеров. Скорость фронта горения в аэровзвеси порошка алюминия сильно зависит от коэффициента избытка окислителя. По данным [3] чем меньше коэффициент избытка окислителя, тем выше скорость пламени. В [4] представлены экспериментальные результаты и результаты расчетов по математической модели скорости распространения фронта горения для соотношения массы горючего к массе окислителя в интервале значений 0.65–1. В этой области скорость распространения фронта горения в аэровзвеси частиц алюминия размером 5.5–6.5 мкм практически постоянная и имеет величину 0.22–0.25 м/с. Также в [4] приведены данные о скорости распространения фронта горения в аэровзвеси нанопорошков алюминия, полученные на основе расчетов по модели. Показано, что с уменьшением размера частиц скорость распространения фронта горения возрастает и при раз-

¹ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20011).

мерах частиц 100 нм и соотношении массы горючего к массе окислителя 0.85 скорость составляет 2.5–3 м/с.

В настоящей работе проводится математическое моделирование горения аэровзвеси нанопорошка алюминия. Целью работы является определение зависимости скорости распространения фронта горения от массовой концентрации нанодисперсного порошка алюминия в воздухе и от начальной температуры аэровзвеси.

Предполагается, что в трубке большого диаметра и длины с закрытым торцом слева и открытым справа находится аэровзвесь нанодисперсного порошка алюминия. В начальный момент времени порошок по области распределен равномерно, а его массовая концентрация меньше стехиометрической. На левом торце трубки имеется высокотемпературный источник зажигания, который воспламеняет аэровзвесь нанопорошка алюминия. После воспламенения в аэровзвеси начинает распространяться волна горения. Необходимо определить скорость распространения волны горения относительно стенок трубки в зависимости от начальной температуры аэровзвеси и массовой концентрации порошка алюминия.

В математических моделях горения замороженной водяной суспензии нанопорошка алюминия [5] и смеси ультрадисперсного алюминия с водой [6] используется квадратичный закон для времени сгорания частицы алюминия от ее диаметра в парах воды [7]. В этих моделях температура зажигания частиц алюминия является параметром. По данным [8] время сгорания наночастиц алюминия в горячем газе зависит не только от диаметра, но и от давления, температуры и состава окружающего газа. В [8] отмечается, что в силу малости размера частиц характерное время диффузии $r_0^2/D(T_*)$ (r_0 – радиус частицы, $D(T_*)$ – коэффициент диффузии при температуре окружающего газа T_*) для наноразмерных частиц сравнимо с характерным временем химической реакции. В связи с этим при моделировании окисления наноразмерных частиц алюминия необходимо учитывать диффузию через слой оксида алюминия и зависимость скорости реакции от температуры и концентрации реагентов.

Сформулируем предположения математической модели горения одиночной наночастицы алюминия в среде газообразного окислителя. Предполагается, что частица имеет сферическую форму, на ее поверхности имеется тонкий слой оксида. Частица попадает в газообразный окислитель, быстро нагревается до температуры окружающего газа, и после этого температура газа и частицы не меняется. Тепло, выделяющееся в реакции окисления алюминия, передается в окружающий газ, при этом изменением температуры газа пренебрегается из-за малой объемной доли частиц в газе. Через слой оксида алюминия происходит диффузия кислорода (или другого окислителя). Разогретый выше температуры плавления алюминий, находящийся под слоем оксида алюминия, также диффундирует через слой оксида алюминия. В слое оксида и на границе между оксидом и расплавленным алюминием под слоем оксида происходит реакция окисления алюминия до конечного продукта Al_2O_3 . Предполагается, что шаровой слой оксида алюминия не разрушается под действием возникающих напряжений в результате роста слоя оксида алюминия. Для сформулированных предположений математическая модель горения одиночной наночастицы алюминия в газообразном окислителе будет состоять из уравнений диффузии окислителя и алюминия в слое оксида алюминия с учетом их расходования в химической реакции:

$$\frac{\partial \rho_O}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_O}{\partial r} = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_2 \frac{\partial a_O}{\partial r} \right) - \frac{3\mu_O}{2\mu_{Al}} \rho_{Al} \frac{\rho_O}{\rho_2} p k_{01} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right); \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_{Al}}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_{Al}}{\partial r} = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_2 \frac{\partial a_{Al}}{\partial r} \right) - \rho_{Al} \frac{\rho_O}{\rho_2} p k_{01} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (2)$$

где $a_O = \rho_O / \rho_2$ – массовая концентрация кислорода в газе, $a_{Al} = \rho_{Al} / \rho_2$ – массовая концентрация алюминия в газе, t – время; r – радиальная координата; T – температура; ρ_O – парциальная плотность окислителя; ρ_{Al} – парциальная плотность алюминия в слое оксида; ρ_2 – плотность газа; μ_{Al} – молекулярная масса алюминия; μ_O – молекулярная масса атома кислорода; D_0 – коэффициент зависимости коэффициента диффузии от температуры; E_d – энергия активации диффузии; E_a – энергия активации химической реакции; R – универсальная газовая постоянная; u – скорость перемещения слоя оксида; k_{01} – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса; p – давление в газе.

Начальные условия для уравнений (1), (2) имеют вид

$$\rho_O(r, 0) = \rho_{O,0}, \quad \rho_{Al}(r, 0) = \rho_{Al,0}. \quad (3)$$

На внешней поверхности слоя оксида поток массы окислителя определяется соотношением

$$D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \rho_2 \frac{\partial a_O(r_0(t), t)}{\partial r} = -\beta(\rho_O(r_0(t), t) - \rho_{O,\infty}), \quad (4)$$

где β – коэффициент массообмена, $\beta = D_g / r_0(t)$; $D_g = k_1 (T/T_*)^{k_2} p_0 / p$ – коэффициент диффузии окислителя, $k_1 = 1.13 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $k_2 = 1.724$ [8]; p – давление газа; $p_0 = 1 \text{ атм}$ – атмосферное давление; $T_* = 1 \text{ К}$ – референтная температура; $r_0(t)$ – внешний радиус слоя оксида.

На внутренней поверхности слоя оксида поток массы окислителя определяется соотношением

$$D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \rho_2 \frac{\partial a_O(r_1(t), t)}{\partial r} = \rho_O(r_1(t), t) K(T), \quad K(T) = \frac{\rho_O}{\rho_2} p k_{02} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (5)$$

где $K(T)$ – скорость гетерогенной реакции на границе между слоем оксида и расплавленным алюминием; k_{02} – предэкспоненциальный множитель; $r_1(t)$ – внутренний радиус слоя оксида.

Граничные условия для уравнения парциальной плотности алюминия в слое оксида (2):

$$\frac{\partial a_{Al}(r_0(t), t)}{\partial r} = 0, \quad (6)$$

$$\rho_{Al}(r_1(t), t) = \rho_{Al,1}. \quad (7)$$

Скорость движения внутренней границы слоя оксида $u_1(t) = \frac{dr_1}{dt}$ находится из соотношения, определяющего сохранение потоков массы алюминия и кислорода

на этой границе:

$$-D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \rho_2 \frac{\partial a_O(r_1(t), t)}{\partial r} \frac{2\mu_{Al}}{3\mu_O} + \\ + D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \rho_2 \frac{\partial a_{Al}(r_1(t), t)}{\partial r} = u_1(t) \rho_{\text{liq Al}}, \quad (8)$$

где $\rho_{\text{liq Al}}$ – плотность расплавленного алюминия.

Скорость движения внешней границы слоя оксида $u_0(t) = \frac{dr_0}{dt}$ определяется из соотношения

$$u_0(t) = u_1(t) \frac{r_0^2}{r_1^2} - u_1(t) \frac{r_0^2}{r_1^2} \frac{2\mu_{Al} + 3\mu_O}{2\mu_{Al}}. \quad (9)$$

Выражение (9) определяет скорость нарастания радиуса частицы в предположении равенства плотностей расплавленного алюминия и слоя оксида. Скорость $u_1(t)$ отрицательная, скорость $u_0(t)$ положительная. Скорость перемещения внутренних точек слоя оксида определяется выражением

$$u(r, t) = u_1(t) \frac{r_0^2}{r^2} - u_1(t) \frac{r_0^2}{r^2} \frac{2\mu_{Al} + 3\mu_O}{2\mu_{Al}}. \quad (10)$$

Решение системы уравнений (1), (2) с условиями (3) – (7) и определением скорости движения слоя оксида по (8) – (10) проводится по неявной разностной схеме методом прогонки. Расчеты проводились при следующих значениях физических величин:

$$R = 8.31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}, \quad \rho_{\text{liq Al}} = 2700 \text{ кг/м}^3, \quad D_0 = 1.57 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с},$$

$$E_d = 10 \text{ кДж/моль}, \quad E_a = 71.6 \text{ кДж/моль}, \quad \rho_{Al_1} = 0.3456 \text{ кг/м}^3,$$

$$\mu_g = 0.029 \text{ кг/моль}, \quad \mu_{Al} = 0.027 \text{ кг/моль}, \quad \mu_O = 0.016 \text{ кг/моль},$$

$$k_{01} = 43700 \text{ (1/(с} \cdot \text{Па))}, \quad k_{02} = 4.37 \cdot 10^{-8} \text{ м/(с} \cdot \text{Па)}.$$

Окружающий газ представляет собой смесь кислорода с азотом в пропорции 50:50, как в [8]. Расчеты проводились для $r_0 = 40 \text{ нм}$, при температуре газа в интервале $T = 1200 - 2200 \text{ К}$, давлении $p_a = 0.8 \text{ МПа}$ и $p_a = 3.2 \text{ МПа}$ [8]. Плот-

ность газа определялась из уравнения $\rho_2 = \frac{\mu_g p}{RT} \text{ кг/м}^3$.

В расчетах определялось время полного сгорания алюминия в частице для заданных значений температуры и давления газа, которые представлены на рис. 1. При давлении $p_a = 0.8 \text{ МПа}$ и температуре 2000 К частица алюминия радиусом 40 нм сгорает за время 107 мкс , что совпадает с данными измерений, представленных в [8, 9], приведенных на рис. 1. Увеличение давления и температуры приводит к уменьшению времени сгорания.

Результаты расчетов по математической модели (1) – (10) были использованы для моделирования горения аэрозвеси наночастиц алюминия.

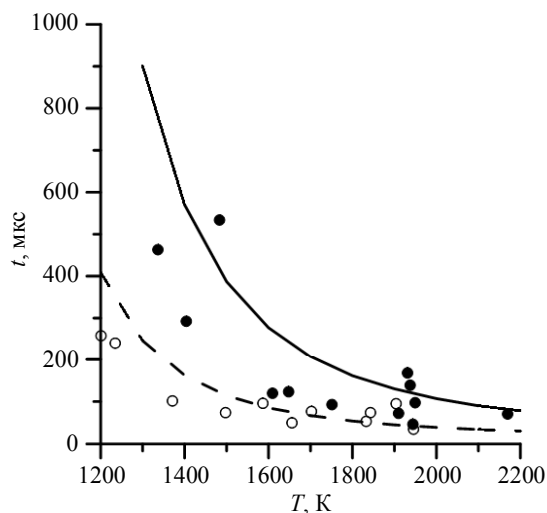


Рис. 1. Время сгорания частицы алюминия радиусом $r_0 = 40$ нм при давлении газа $p_a = 0.8$ МПа (сплошная линия), $p_a = 3.2$ МПа (штриховая линия). Экспериментальные данные из [9]: ● – $p_a = 0.8$ МПа, ○ – $p_a = 3.2$ МПа

Fig. 1. Combustion time of an aluminum particle with the radius of $r_0 = 40$ nm at a gas pressure of $p_a = 0.8$ MPa (solid line) and $p_a = 3.2$ MPa (dashed line). Experimental data from [9]: ● – $p_a = 0.8$ MPa and ○ – $p_a = 3.2$ MPa

При зажигании и распространении фронта горения по аэровзвеси нанопорошка алюминия происходит расширение газа и его движение. Частицы увлекаются потоком воздуха и движутся в нем. Предполагается, что процессы происходят в изобарических условиях и наночастицы алюминия имеют известную начальную толщину слоя оксида. В потоке воздуха перед фронтом горения частицы нагреваются, реагируют с кислородом воздуха через слой оксида. Механизм окисления описывается системой уравнений (1) – (10). Из системы уравнений (1) – (10) в каждой частице, находящейся в данный момент времени на расстоянии x от левого торца трубки, по величине скорости перемещения границы между расплавом алюминия и слоя оксида определяется расход кислорода из газовой фазы выражением

$$g = -4\pi r_l^2 \rho_{\text{liq Al}} u_1(x) \frac{3}{2} \frac{\mu_O}{\mu_{\text{Al}}}. \quad (11)$$

Каждая частица в потоке окислителя участвует в теплообмене, массообмене, обмену импульсом с окружающим газом. Значения $\rho_{O,\infty}$ в (4), температуры частицы T в (1) – (8) и скорости ее движения в каждой точке пространства вдоль трубки определяются из системы уравнений эволюции параметров газовой фазы и совокупности частиц в трубке. При постановке задачи полагается, что массовая концентрация нанопорошка алюминия существенно меньше стехиометриче-

ской, и в уравнении сохранения массы кислорода в воздухе не учитывается его диффузия.

Постановка задачи при сформулированных допущениях имеет вид

- уравнение энергии для газа:

$$c_2 \rho_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} + v \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + 4\pi \alpha r_k^2 n (T_3 - T_2), \quad (12)$$

- уравнение неразрывности для газа:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 v)}{\partial x} = -G, \quad (13)$$

- уравнения баланса массы кислорода:

$$\frac{\partial \rho_{O,\infty}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{O,\infty} v)}{\partial x} = -G, \quad (14)$$

- уравнение энергии для частиц:

$$c_3 \rho_3 \left(\frac{\partial T_3}{\partial t} + w \frac{\partial T_3}{\partial x} \right) = -4\pi \alpha r_k^2 n (T_3 - T_2) + G Q_{Al} \frac{2\mu_{Al}}{3\mu_O}, \quad (15)$$

- уравнения баланса массы частиц:

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_3 w)}{\partial x} = G, \quad (16)$$

- уравнение движения частиц:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial x} = -\tau_{fr}, \quad (17)$$

- уравнение счетной концентрации частиц:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nw)}{\partial x} = 0, \quad (18)$$

- уравнение состояния газа:

$$p = \frac{1}{\mu_{air}} \rho_2 R T_2 = \text{const}, \quad (19)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} T_2(x, 0) = T_N, \quad T_3(x, 0) = T_N, \quad \rho_2(x, 0) = \frac{\mu_{air} p}{R T_N}, \quad \rho_{O,\infty}(x, 0) = 0.2 \rho_2(x, 0), \\ \rho_3(x, 0) = \rho_{3,0}, \quad v(x, 0) = 0, \quad w(x, 0) = 0, \quad n(x, 0) = n_{3,0}. \end{aligned} \quad (20)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} T_2(0, t) = T_S, \quad \frac{\partial T_2(\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_3(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_2(0, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho_{O,\infty}(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_3(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial n(0, t)}{\partial x} = 0, \quad w(0, t) = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

В уравнениях (10) – (20) приняты следующие обозначения: t – время; x – координата; T_2 – температура газовой смеси; T_3 – температура частиц; T_N – начальная температура аэрозвеси; T_S – температура стенки (левого торца) трубки; ρ_2 –

плотность газа; $\rho_{O,\infty}$ – парциальная плотность кислорода; ρ_3 – приведенная плотность частиц (масса частиц в единице объема); ρ_k – плотность вещества частицы; n – число частиц в единице объема; v – скорость газа; w – скорость движения частиц; p – давление; r_k – радиус частицы; $r_{Al,0}$ – начальный радиус частицы алюминия; μ_{Al} , μ_O , μ_{air} – молярные массы алюминия, атома кислорода, воздуха; c_2 – удельная теплоемкость воздуха при постоянном давлении; λ_2 – коэффициент теплопроводности газа; α – коэффициент теплоотдачи; G – скорость изменения массы частиц при их горении; Q_{Al} – теплота сгорания алюминия в кислороде; R – универсальная газовая постоянная; τ_{fr} – сила взаимодействия частиц с газом.

Скорость движения, температура частиц и парциальная плотность кислорода определяется из решения системы уравнений (12) – (19). Эти величины используются в граничных условиях и параметрах для решения системы уравнений (1) – (2). Из системы уравнений (1) – (2) с граничными условиями (4) – (7) в каждой частице, находящейся в данный момент времени на расстоянии x от левого торца трубы, по величине скорости перемещения границы между расплавом алюминия и слоя оксида определяется расход кислорода из газовой фазы выражением:

$$G = gn. \quad (22)$$

В результате из решения совокупности задач окисления частиц из модели на «микроуровне» (1), (2) в каждой точке пространства определяются правые части (22), связанные с массообменом, для модели на «макроуровне» (12) – (21).

Сила взаимодействия частиц алюминия с газом вычисляется по формуле

$$\tau_{fr} = \frac{F_{fr}}{4/3 \pi r_k^3 \rho_k}, \quad F_{fr} = C_R S_m \frac{\rho_2 (w - v) |v - w|}{2}. \quad (23)$$

Здесь коэффициент сопротивления определяется по эмпирической формуле [10]:

$$C_R = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,682}), \quad Re = \frac{2r_k \rho_2 |v - w|}{\eta}, \quad r_k = \sqrt[3]{\frac{\rho_3}{(4/3) \pi n \rho_k}}.$$

Коэффициент теплоотдачи определяется как

$$\alpha = \frac{Nu \lambda_2}{2r_k}, \quad Nu = 2 + \sqrt{Nu_l^2 + Nu_t^2}, \quad (24)$$

где $Nu_l = 0,664 Re^{0,5}$, $Nu_t = 0,037 Re^{0,8}$ [10]; C_R – коэффициент сопротивления; F_{fr} – сила сопротивления сферы при обтекании; S_m – площадь миделева сечения; η – коэффициент динамической вязкости; Nu – число Нуссельта; Re – число Рейнольдса.

Представленная модель в отличие от моделей, описанных в [5, 6], не требует задания температуры зажигания наночастиц алюминия. Скорость окисления наночастиц алюминия и связанная с ним скорость тепловыделения определяются из решения системы уравнений (1) – (2).

Система уравнений (1), (2) с граничными условиями (3) – (7) и (12) – (19) с граничными и начальными условиями (20) – (21) и выражениями для правых час-

тей решалась численно. Система уравнений (1), (2) с граничными условиями (3) – (7) решалась численно по неявной разностной схеме методом прогонки. Уравнение (12) решалось по неявной разностной схеме методом прогонки. Уравнения (14) – (18) решаются по явной разностной схеме с использованием аппроксимации конвективных слагаемых разностями против потока. Для обеспечения устойчивости численного решения используется условие устойчивости вида $\Delta t < \Delta x / \max[v_i]$, где Δt – шаг по времени, Δx – шаг по пространству, v_i – скорость в точках разностной сетки. Уравнение (13) аппроксимируется неявной разностной схемой с использованием разностей против потока. Из разностного аналога уравнения (13) при известных значениях плотности на n -ом и $n+1$ -м временных слоях бегущим счетом определяется скорость движения газовой фазы. Системы уравнений (1), (2) и (12) – (19) решаются в соответствии со следующим алгоритмом вычисления значений неизвестных на $n+1$ -м временном слое (счет шага по времени). Из решения системы уравнений (1), (2) в каждой точке по пространству по формуле (22) определяются величины расхода кислорода из газовой фазы. Тем самым определяются правые части уравнений (13) – (16), связанные с массообменом и тепловыделением от химического реагирования. По уравнению (12), записанному в разностной форме, вычисляется температура газа на $n+1$ -ом временном слое. По уравнению (14) вычисляется парциальная плотность кислорода. По уравнению (19) – плотность газа при заданном давлении. По уравнению (13) – скорость газа, по уравнению (15) – температура частиц, по уравнению (17) – скорость движения частиц, по уравнению (18) – количество частиц в единице объема, по уравнению (16) – распределенная плотность частиц. Счет шага по времени повторяется необходимое количество раз. Расчеты проводятся до установления стационарного распространения фронта горения в трубке.

На основе описанного алгоритма составлена компьютерная программа. Проведено исследование численного решения на сходимость при уменьшении величины шага по пространству на основании которого была выбрана величина шага по пространству, обеспечивающая сходимость результатов с погрешностью не более 0.3 %. В процессе расчетов контролировалась выполнимость законов сохранения массы и энергии, которые выполнялись с точностью 99.5 %.

Численное исследование горения аэрозвеси наночастиц алюминия проводилось для начальной массовой концентрации порошка алюминия в интервале значений $\rho_{3,0} = 0.07 - 0.08 \text{ кг/м}^3$, при начальной температуре $T_N = 293, 393, 493 \text{ К}$, атмосферном давлении $p = 0.1 \text{ МПа}$ и размере частиц $r_{\text{Al},0} = 40 \text{ нм}$. Расчеты проводились при следующих значениях теплофизических и формально-кинетических величин:

$$\begin{aligned} c_{\text{Al}} &= 903 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}, c_2 = 1000 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}, \rho_k = 2700 \text{ кг/м}^3, \\ \rho_{\text{liqAl}} &= 2700 \text{ кг/м}^3, \rho_{\text{Al},1} = 0,346 \text{ кг/м}^3, R = 8.31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}, \eta = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}, \\ \lambda_2 &= 1 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}, Q_{\text{Al}} = 36.0 \text{ МДж/кг}, \mu_{\text{Al}} = 0.027 \text{ кг/моль}, \mu_{\text{O}} = 0.016 \text{ кг/моль}, \\ \mu_{\text{air}} &= 0.029 \text{ кг/моль}, D_0 = 1.884 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}, E_d = 10 \text{ кДж/моль}, \\ E_a &= 71.6 \text{ кДж/моль}, k_{01} = 4.37 \cdot 10^4 \text{ л/(с} \cdot \text{Па)}, k_{02} = 4.37 \cdot 10^{-8} \text{ м/(с} \cdot \text{Па)}. \end{aligned}$$

На рис. 2 представлены распределения температуры аэровзвеси наночастиц алюминия при распространении фронта горения. Распределения построены в последовательные моменты времени через $\Delta t = 0.4 \cdot 10^{-3}$ с. Видно, что после зажигания и периода существенно нестационарного распространения фронта горения происходит выход распространения фронта горения на стационарный режим.

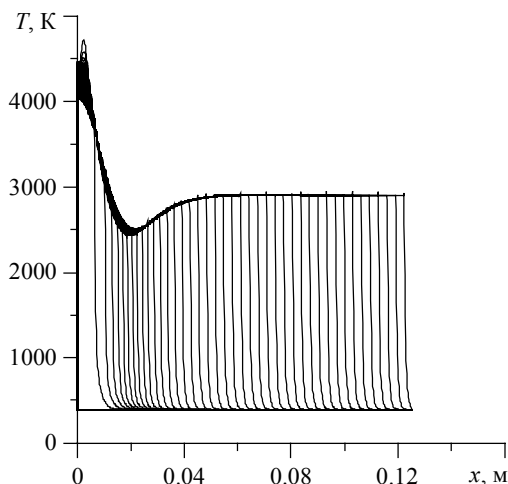


Рис. 2. Распределения температуры газа по длине в последовательные моменты времени через $\Delta t = 0.4 \cdot 10^{-3}$ с. $T_N = 393$ К, $\rho_{3,0} = 0.08$ кг/м³

Fig. 2. Gas temperature distributions along the length at successive time instants at an interval of $\Delta t = 0.4 \cdot 10^{-3}$ s for $T_N = 393$ K and $\rho_{3,0} = 0.08$ kg/m³

На рис. 3 представлены распределения параметров состояния аэровзвеси наночастиц алюминия в окрестности фронта горения при установившемся режиме его распространения. Видно, что в узкой зоне реакции происходит повышение температуры до ее конечной, адиабатической, частицы выгорают. Перед фронтом горения скорость газа и частиц повышается, за фронтом скорость становится равной нулю.

В таблице представлены величины скорости распространения волны горения в аэровзвеси нанодисперсного порошка алюминия относительно лабораторной системы координат, V_f , и относительно исходной газозвеси, V_n . Видно, что с увеличением начальной температуры и массовой концентрации порошка скорость распространения фронта горения увеличивается. Результаты качественно совпадают с данными [4].

$\rho_{3,0}$, кг/м ³	T_N , °C	V_f , м/с	V_n , м/с
0.07	20	2.03	0.11
	120	5.36	0.86
	220	10.71	2.11
0.08	20	3.41	0.61
	120	8.06	1.06
	220	15.0	3.00

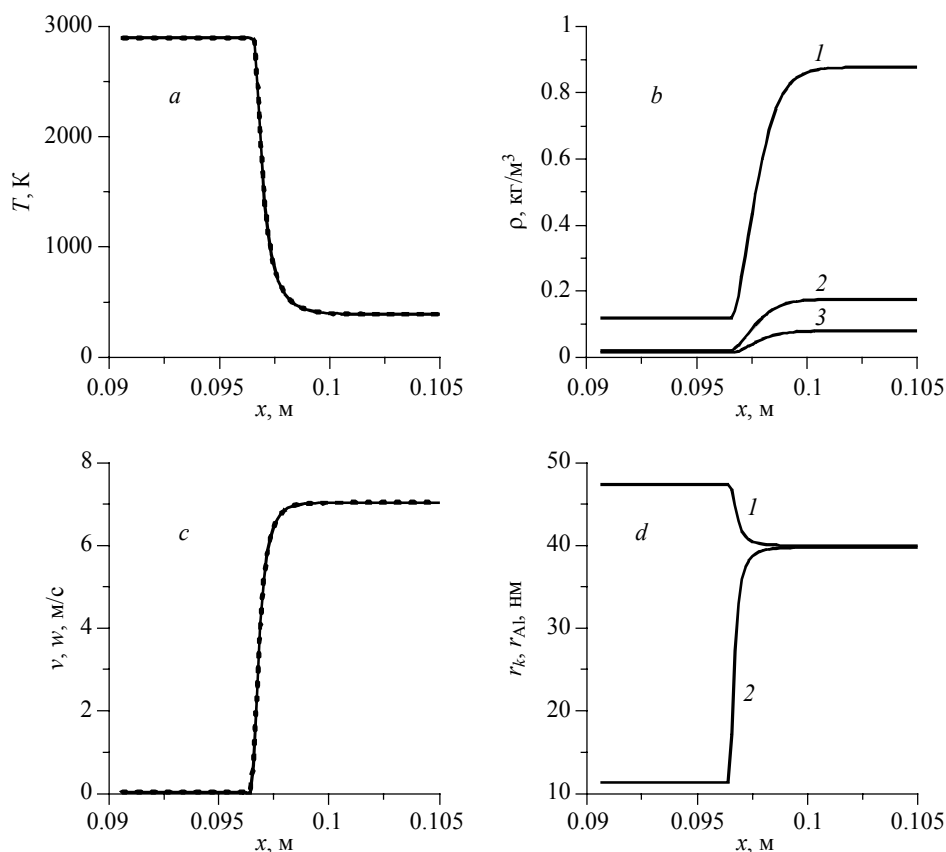


Рис. 3. Распределение температуры газа (сплошные линии) и частиц (пунктирные линии) (a); плотности газа (1), парциальной плотности кислорода (2), распределенной плотности частиц (3) (b); скорости движения газа (сплошные линии) и частиц (пунктирные линии) (c); радиуса частиц (1) и не сгоревшей части алюминия в частице (2) (d). $T_N = 393$ К, $\rho_{3,0} = 0.08$ кг/м³

Fig. 3. Distributions of the (a) temperature of gas (solid lines) and particles (dashed lines), (b) 1, gas density, 2, partial oxygen density, and 3, distributed particle density, (c) velocity of gas (solid lines) and particles (dashed lines), and (d) the radius of 1, particles and 2, unburned part of aluminum in the particle at $T_N = 393$ К, $\rho_{3,0} = 0.08$ kg/m³

Таким образом, разработана математическая модель горения аэрозвеси нанодисперсного порошка алюминия. Для моделирования горения наночастиц алюминия используется локальная математическая модель диффузии окислителя через слой оксида алюминия на поверхности частицы с учетом его реакции с алюминием. Из решения локальных задач горения наночастиц алюминия для всей совокупности частиц в аэрозвеси определяется скорость окисления наночастиц алюминия и связанная с ним скорость тепловыделения. Параметры состояния аэрозвеси наночастиц алюминия определяются из решения системы уравнений сохранения энергии газа, частиц и сохранения массы компонентов газодисперсной смеси. Разработанная модель не требует задания температуры зажигания наноча-

стиц алюминия. Решение системы уравнений математической модели проведено численно. Определены зависимости скорости распространения фронта горения от массовой концентрации нанодисперсного порошка алюминия в воздухе и от начальной температуры аэрозвеси.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ультрадисперсные и наноразмерные порошки: создание, строение, производство и применение* / под ред. акад. В.М. Бузника. Томск: Изд-во НТЛ, 2009. 192 с.
2. *Физика и химия горения нанопорошков металлов в азотсодержащих газовых средах* / под ред. А.А. Громова. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. 332 с.
3. Ягодников Д.А. Воспламенение и горение порошкообразных металлов. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. 432 с.
4. Huang Y., Risha G.A., Yang V., Yetter R.A. Effect of particle size on combustion of aluminum particle dust in air // *Combustion and Flame*. 2009. No. 156. С. 5–13.
5. Крайнов А.Ю., Порязов В.А. Математическое моделирование горения замороженной суспензии нанодисперсного алюминия // *Физика горения и взрыва*. 2016. Т. 52. № 2. С. 60–66.
6. Порязов В.А., Крайнов А.Ю. Математическая модель и расчет нестационарной скорости горения металлизированных твердых ракетных топлив // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2017. № 50. С. 99–111.
7. Бекстед М.В. Анализ данных по времени горения частиц алюминия // *Физика горения и взрыва*. 2005. Т. 41. № 5. С. 55–69.
8. Сандарам Д., Янг В., Зарко В.Е. Горение наночастиц алюминия (обзор) // *Физика горения и взрыва*. 2015. Т. 51. № 2. С. 37–63.
9. Bazyn T., Krier H., Glumac N. Combustion of nanoaluminum at elevated pressure and temperature behind reflected shock waves // *Combustion and Flame*. 2006. V. 145. No. 4. P. 703–713.
10. *Справочник по теплообменникам*: в 2 т. Т. 1. Москва: Энергоатомиздат, 1987.

Статья поступила 20.03.2018 г.

Krainov A.Yu., Poryazov V.A., Moiseeva K.M. FLAME PROPAGATION VELOCITY IN AN AERO-SUSPENSION OF NANOSCALE ALUMINUM POWDER. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 53. pp. 95–106

DOI 10.17223/19988621/53/9

Keywords: aero-suspension of nanodispersed aluminum powder, combustion rate, processes in a gas phase, mathematical modeling.

A mathematical model of the combustion of aero-suspension of nanodispersed aluminum powder is presented. Modeling of the combustion of aluminum nanoparticles is implemented using the local mathematical model of the oxidizer diffusion through aluminum oxide layer on the surface of the particle with account for its reaction with aluminum. The rate of oxidation of aluminum particles and the associated rate of heat release are determined from the solution of local problems on the combustion of aluminum nanoparticles. The state parameters of the aero-suspension of aluminum nanoparticles in the air are determined from the solution of the system of equations of energy conservation for gas and particles, and the equation of mass conservation for components of the gas-dispersed mixture. A developed model does not require specification of the ignition temperature of aluminum nanoparticles.

Numerical solution of the stated problem allowed one to obtain the dependence of the propagation velocity of combustion front on the mass concentration of nanodispersed aluminum powder in the air and on the initial temperature of aluminum powder. Propagation velocity of

combustion front was found to increase with increasing initial temperature and mass concentration of the powder.

KRAINOV Aleksey Yurievich (Doctor of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

PORYAZOV Vasilii Andreevich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: poryazov@mail.ru

MOISEEVA Kseniya Mikhaylovna (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: Moiseeva_KM@t-sk.ru

REFERENCES

1. Biryukov Yu.A., Buznik V.M., Dunaevskiy G.E. (2009) *Ul'tradispersnye i nanorazmernye poroshki: sozдание, stroenie, proizvodstvo i primeneniye* [Ultrafine and nanosized powders: creation, structure, production, and application]. Tomsk: Izd-vo NTL.
2. Gromov A.A., Il'in A.P., Ditts A.A. (2007) *Fizika i khimiya goreniya nanoporoshkov metallov v azotsoderzhashchikh gazovykh sredakh* [Physics and chemistry of combustion of metal nanopowders in nitrogen-containing gases]. Tomsk: Izd-vo Tomskogo Universiteta.
3. Yagodnikov D.A. (2009) *Vosplamneniye i gorenie poroshkoobraznykh metallov* [Ignition and combustion of powdered metals]. Moscow: MGTU im. N.E. Bauman.
4. Huang Y., Risha G.A., Yang V., Yetter R.A. (2009) Effect of particle size on combustion of aluminum particle dust in air. *Combustion and Flame*. 56. pp. 5–13. DOI: 10.1016/j.combustflame.2008.07.018.
5. Krainov A.Yu., Poryazov V.A. (2016) Mathematical modeling of combustion of a frozen suspension of nanosized aluminum. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 52(2). pp. 177–183. DOI: 10.1134/S0010508216020076.
6. Poryazov V.A., Krainov A.Yu. (2017) Matematicheskaya model' i raschet nestatsionarnoy skorosti goreniya metallizirovannykh tverdykh raketnykh topliv [Mathematical model and calculation of the unsteady combustion rate of metallized solid rocket propellants]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 50. pp. 99–111.
7. Beckstead M.W. (2005) Correlating aluminum burning times. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 41(5). pp. 533–546. DOI: 10.1007/s10573-005-0067-2.
8. Sundaram D.S., Yang V., Zarko V.E. (2015) Combustion of nano aluminum particles (Review). *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 51 (2). pp. 173–196. DOI: 10.1134/S0010508215020045.
9. Bazyn T., Krier H., Glumac N. (2006) Combustion of nanoaluminum at elevated pressure and temperature behind reflected shock waves. *Combustion and Flame*. 145(4). pp. 703–713. DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.12.017.
10. Schlünder E.U., Spalding D.B., Taborek J. (1987) *Heat Exchanger Design Handbook: HEDH. Heat exchanger theory*. VDI-Verlag.