МЕХАНИКА

Челябинский физико-математический журнал. 2025. Т. 10, вып. 4. С. 733–749.

УДК 532.529+541.126 DOI: 10.47475/2500-0101-2025-10-4-733-749

ТЕСТИРОВАНИЕ МОДЕЛИ ДЕТОНАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ ВОЗДУШНОЙ ВЗВЕСИ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

С. А. Лаврук[a], А. А. Афанасенков

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия
[a]*lavruk@itam.nsc.ru*

Методами численного моделирования проведено тестирование приведённой кинетической схемы детонационного горения частиц алюминия в воздухе, учитывающей образование газообразных и конденсированных субокислов алюминия. Представлены результаты тестирования численного алгоритма с применением методов параллельного программирования и использованием численной схемы Рунге — Кутты различных порядков по времени. Представлены результаты расчётов ячеистой детонации взвесей алюминия в воздухе различной дисперсности и загрузки. Показано, что степень регулярности ячеистой структуры и размер ячейки определяется размером и загрузкой частиц. Скорость детонации слабо зависит от размера частиц и существенно зависит от загрузки. Результаты согласуются с экспериментальными и расчётными данными других авторов.

Ключевые слова: *численное моделирование, гетерогенная детонация, газовзвеси частиц алюминия, приведённая модель кинетики.*

Введение

Интерес к изучению механизмов горения частиц алюминия обусловлен широким применением в промышленности, в частности, авиационной, автомобильной и т. д. При механической обработке изделий из алюминия происходит образование мелкодисперных облаков алюминиевой пыли, которые при воспламенении могут привести к взрывам с серьёзными разрушениями и человеческими жертвами [1–3]. Кроме того, частицы алюминия могут использоваться в качестве добавок или основного топлива в различных смесях [4–12].

Описание горения алюминия проводится, как правило, в рамках приведённой кинетики. Это связано с тем, что многостадийные схемы детальной кинетики требуют больших расчётных затрат и применимы лишь к нанодисперным частицам, для которых время горения не зависит от размера частиц [13].

На настоящий момент накоплен большой объём экспериментальных и теоретических данных по горению частиц алюминия различной дисперсности (включая наноразмерный диапазон) в различных условиях. Это позволяет создавать адекватные модели детонации, основанные на принципах приведённой кинетики. Такие

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-79-00046, https://rscf.ru/project/24-79-00046/.

модели использовались для описания процессов гетерогенной детонации взвесей алюминия в работах [14–18] и гибридной детонации водородсодержащих смесей с частицами алюминия [4; 5; 7; 19–21].

Процессы горения и детонации частиц алюминия в значительной степени зависят от дисперсности частиц. Крупные частицы горят в диффузионном режиме, время горения определяется квадратичной функцией диаметра частиц и практически не зависит от температуры. Такая зависимость принималась в работах [15; 16; 22]. С уменьшением размера частиц до нескольких микрон и в субмикронном диапазоне режим горения является переходным к кинетическому с изменением зависимости времени горения от размера частиц к степенной с показателем 0.3 [23]. Модель гетерогенной детонации частиц алюминия в кислороде для широкого диапазона концентраций горючих частиц предложена в [24; 25]; модель расширена на широкий диапазон концентраций алюминиевых частиц в горючей смеси, в [24] исследованы процессы детонации в неоднородных по концентрациям взвесях, а также в бидисперсных смесях [26–28].

Основная реакция, учитываемая в моделях детонации взвесей алюминия, выражает взаимодействие алюминия с кислородом с образованием конденсированного оксида алюминия. В расширенной модели гибридной детонации [20] учитывается также реакция с образованием газообразных субокислов и процесс испарения и декомпозиции конденсированного оксида в газообразные субокислы. Модель [20] валидирована по экспериментальным данным гибридной детонации водородно-воздушных взвесей с частицами алюминия, однако валидации данной модели на течениях гетерогенной детонации взвесей частиц алюминия в воздухе или кислороде не проводилось.

Целью настоящей работы является доработка модели гетерогенной детонации воздушных взвесей алюминия в широком диапазоне концентраций и размеров частиц на основе модели [20], валидация модели, доработка и тестирование численного алгоритма на основе параллельных технологий. Будут представлены некоторые результаты расчётов двумерных детонационных течений.

1. Физико-математическая модель

Физико-математическая модель основана на уравнениях механики взаимопроникающих континуумов, вытекающих из законов сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x} + \frac{\partial G_i}{\partial y} = \Gamma_i, \;\; i = 1, 2, 3.$$

Индекс 1 относится к газовой фазе, 2 и 3 — к частицам алюминия и оксиду алюминия.

Векторы решения и потоков имеют вид: для газовой фазы

$$W_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_{O2} \\ \rho_{Alox} \\ \rho_{N2} \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_1 E_1 \end{pmatrix}, F_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ \rho_{O2} u_1 \\ \rho_{Alox} u_1 \\ \rho_{N2} u_1 \\ p + \rho_1 {u_1}^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p u_1 \end{pmatrix}, G_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_{O2} v_1 \\ \rho_{Alox} v_1 \\ \rho_{N2} v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p + \rho_1 {v_1}^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p v_1 \end{pmatrix},$$

для дискретных компонент

$$W_i = \begin{pmatrix} \rho_i \\ \rho_i u_i \\ \rho_i v_i \\ \rho_i E_i \end{pmatrix}, F_i = \begin{pmatrix} \rho_i u_i \\ \rho_i {u_i}^2 \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i u_i E_i \end{pmatrix}, G_i = \begin{pmatrix} \rho_i v_i \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i {v_i}^2 \\ \rho_i v_i E_i \end{pmatrix}, \ i = 2, 3.$$

Здесь индексы *O2, Alox* обозначают кислород, смесь газообразных продуктов окисления алюминия. Массовая доля азота задаётся в начальном состоянии, в дальнейшем определяется алгебраически.

Правые части записываются следующим образом:

$$\Gamma_1 = -(\Gamma_2 + \Gamma_3), \quad \Gamma_2 = \begin{pmatrix} -(J_{2Al2O3} + J_{2Alox}) \\ f_{2x} - (J_{2Al2O3} + J_{2Alox})u_2 \\ f_{2y} - (J_{2Al2O3} + J_{2Alox})v_2 \\ q_2 + f_{2x}u_2 + f_{2y}v_2 - (J_{2Al2O3} + J_{2Alox})E_2 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_3 = \begin{pmatrix} J_{2Al2O3} \\ f_{3x} + J_{2Al2O3}u_3 \\ f_{3y} + J_{2Al2O3}v_3 \\ q_3 + f_{3x}u_3 + f_{3y}v_3 + J_{2Al2O3}E_3 \end{pmatrix}.$$

Описание горения алюминия проводится на основе модели [15; 29], доработанной и используемой в [24; 28; 30; 31], а также [32; 33]. Формула приведённой кинетики представлена уравнением аррениусовского типа

$$J_2 = \begin{cases} 0, T_2 < T_{ign} \\ \dfrac{1}{\tau_{20}} \rho_2 (d_0/d_2)^\theta (p/p*)^m \exp(-E_a/R_{un}T_2), \ T_2 > T_{ign}, \rho_O > 0 \\ 0, \rho_O = 0 \end{cases} \tag{1}$$

$$m = -0.25 \ln d[\text{мкм}], \quad E_a = 0.5\{E_{\text{micro}}(2 + \ln d[\text{мкм}]) - E_{\text{nano}} \ln d[\text{мкм}]\}, \tag{2}$$

где $\tau_{20} = 0.2$ мкс для кислорода и 0.8 мкс для воздуха, $E_{\text{micro}} = 32$ кДж/моль, $E_{\text{nano}} = 60$ кДж/моль, $\theta = 0.3$ для $d_2 \leqslant 3.5$ мкм [23; 34], $T_{\text{ign}} = 933$ K (температура плавления алюминиевого ядра), d_2 — начальный диаметр частиц алюминия. Различные подходы к описанию горения алюминия обсуждаются в [35]. Здесь предполагается, что при горении частицы образуются либо конденсированные наночастицы оксида алюминия (при T_3<3500 K), либо газообразные продукты (при $T_3 \geqslant$3500 K), 3500 K — температура кипения оксида алюминия. При этом

$$\begin{aligned} J_{2Alox} &= \begin{cases} 0, T_1 < 3500 \text{ K}, \\ J_2(1 + \mu_{O2}/2\mu_{Al}), T_1 \geqslant 3500 \text{ K}; \end{cases} \\ J_{2Al2O3} &= \begin{cases} J_2(1 + 3\mu_{O2}/4\mu_{Al}), T_1 < 3500 \text{ K}, \\ 0, T_1 \geqslant T_{3e}. \end{cases} \end{aligned} \tag{3}$$

Система дополняется уравнениями состояния идеального газа

$$p = \rho_1 R T_1, R = \frac{R_{\text{un}}}{\rho_1} \left(\frac{\rho_O}{\mu_O} + \frac{\rho_{Alox}}{\mu_{Alox}} + \frac{\rho_N}{\mu_N} \right) \tag{4}$$

и калорическими уравнениями состояния для газа и частиц

$$E_1 = \frac{({u_1}^2 + {v_1}^2)}{2} + c_{v,1}T_1 + \xi_{Alox}Q_{Alox},$$
$$E_2 = \frac{({u_2}^2 + {v_2}^2)}{2} + c_{v,2}T_2 + Q_{23}, \quad E_3 = \frac{({u_3}^2 + {v_3}^2)}{2} + c_{v,3}T_3. \tag{5}$$

В (4), (5) μ_O, μ_{Al}, μ_N — молекулярные веса кислорода (O_2), алюминия (Al) и азота (N_2) соответственно, μ_{Alox} — средний молекулярный вес газообразных продуктов окисления алюминия, R_{un} — универсальная газовая постоянная, c_p — теплоёмкость смеси при постоянном давлении [36]. Концентрации газовых компонент определяются как $\xi_{Alox} = \rho_{Alox}/\rho_1$.

Для описания горения частиц алюминия (3) используется приведённая кинетическая схема, состоящая из одной реакции. В ходе данной реакции до температуры 3500 K происходит горение с образованием конденсированных продуктов реакции в виде жидких капель оксида алюминия ($4Al+3O_2 \to 2Al_2O_3$). При образовании частиц оксида алюминия энерговыделение соответствует значению Q_{23}= 15 МДж/кг. Когда реакция горения (3) проходит при температуре свыше 3500 K, рассматривается реакция с образованием газообразных субокислов алюминия. В качестве реакции рассматривается: $Al+O_2 \to 2AlO$. Анализ цепочек реакций детальной кинетики горения алюминия [13; 37] показал, что реакции разложения газообразных субокислов в AlO протекают значительно быстрее основных реакций образования AlO и Al_2O_3. Исходя из этого принято следующее допущение об образовании в качестве газообразного субокисла только AlO. При образовании газообразных субокислов энерговыделение $Q_{2\,Alox}$= 4.5 МДж/кг (соответственно Q_{Alox}=Q_{23}–$Q_{2\,Alox}$). В простейшем приближении принимается, что молекулярный вес этой смеси постоянен ($\mu_{AlO} = \text{const} = \mu_{O2}$). Параметрические расчёты показали слабое влияние параметра μ_{AlO} на скорость детонации и структуру волны Чепмена — Жуге. Это обусловлено его участием лишь в формуле (4), где относительный вклад ρ_{Alox}/μ_{Alox} невелик.

Замыкающие соотношения выражают силы межфазного взаимодействия и теплообмен между газом и двумя дискретными фракциями

$$f_{ix} = \frac{\rho_i}{\tau_{ui}}(u_1 - u_i), \; f_{iy} = \frac{\rho_i}{\tau_{iu}}(v_1 - v_i), \; q_i = \frac{\rho_i c_{v,i}}{\tau_{Ti}}(T_1 - T_i), \; i = 2, 3,$$
$$\tau_{ui} = 4d_i\rho_{ii}/3c_{Di}\rho_{11}\left[(u_1 - u_i)^2 + (v_1 - v_i)^2\right]^{1/2},$$
$$\tau_{Ti} = {d_i}^2\rho_{ii}c_{vi}/6\lambda_1 \mathrm{Nu}_i, \mathrm{Nu}_i = 2 + 0.6{\mathrm{Re}_i}^{1/2}\mathrm{Pr}^{1/3}.$$

Здесь c_{Di} — коэффициенты сопротивления частиц алюминия и образующегося оксида алюминия, c_{v2} — теплоёмкость частиц, Nu, Pr — числа Нуссельта и Прандтля (обычно принимается Pr = 0.7), λ_1 — теплопроводность газа. Для c_{Di} используется аналог формулы Хендерсона [15; 24; 29; 35; 38].

1.1. Численная технология и тестирование алгоритма

Численная технология основана на применении схемы TVD Хартена — Лакса [39] для газовой фазы и схемы Джентри — Мартина — Дэйли [40] для дискретной системы первого порядка по времени. Ранее метод тестировался и использовался для задач гетерогенной детонации (в рамках кинетической модели [24]), некоторые результаты тестирования приведены в [24].

Тестирование проводилось на задаче инициирования и установления гетерогенной детонационной волны в газовзвеси частиц алюминия в одномерной и двумерной постановках.

На рис. 1 показаны результаты тестирования задачи на вложенных сетках в одномерной постановке (установившиеся профили плотности газа на стенке канала на один и тот же момент времени). Здесь можно видеть, что сходимость подтверждается, а различия наблюдаются лишь в узкой зоне горения (рис. 1). Для расчётов далее использовалась сетка с шагом 0.0002 м.

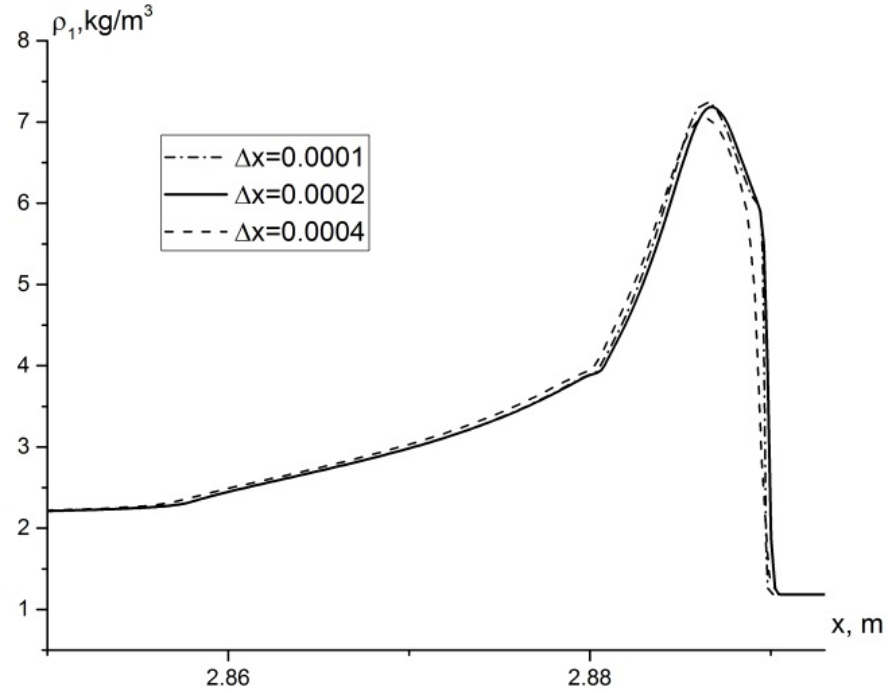

Рис. 1. Профили плотности газа на вложенных сетках

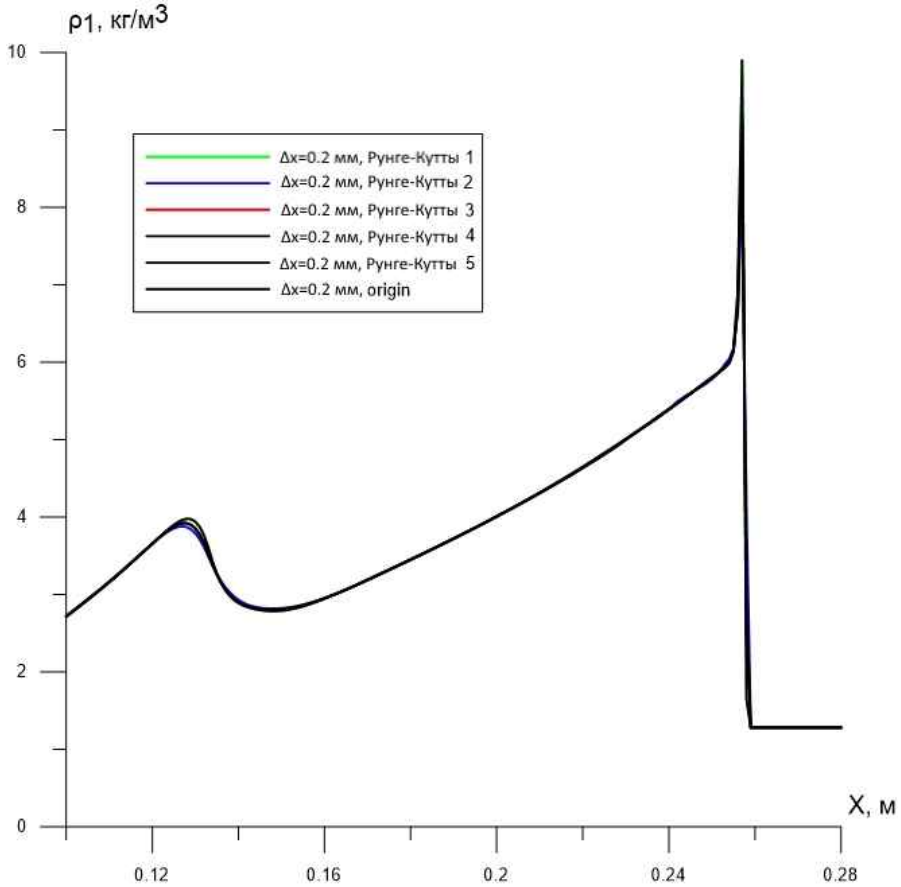

Рис. 2. Профиль плотности газовой фазы при различной точности расчётной схемы по времени

Была проведена работа по увеличению порядка точности по времени для численной схемы TVD. Для этого была рассмотрена схема Рунге — Кутты со второго — четвёртого порядка точности. Корректность работы изменённой программы проверялась на тестовой задаче о распространении гетерогенной детонационной волны по плоскому каналу. Сравнение проводилось с результатами расчётов оригинальной программы с первым порядком точности по времени, профили плотности газа на один и тот же момент времени показаны на рис. 2 (одномерный расчёт). Видно, что профили сливаются полностью, т. е. вне зависимости от порядка схемы решение остаётся неизменным. Имеются незначительные расхождения в точках перегиба в волне разрежения. Однако повышение порядка аппроксимации по времени ведёт к увеличению времени расчёта схемы: в 1.9 раза для 2-го порядка, 2.5 — для 3-го, 3.5 — для 4-го, 4.1 — для 5-го при одинаковом числе Куранта. Это объясняется тем, что для реализации подобной схемы требуются пересчитывать параметры для каждого шага схемы. Тесты показали, что для используемой схемы TVD применение схем с большими порядками точности по времени не даёт прироста производительности. Поскольку в TVD схеме используется адаптивный шаг по времени [39], то увеличение порядка точности по времени приводит только к увеличению повторения циклов.

Для ускорения расчётов была применена технология параллельного программирования с использованием библиотеки OpenMP. При тестировании эффективности распараллеливания задачи рассматривались в одномерной и двумерной постановке. При распараллеливании программы со схемой Рунге — Кутты первого порядка на 4 потока расчёт происходит в 1.8 раза быстрее исходной программы. Схемы Рунге — Кутты более высоких порядков работают медленнее исходной схемы: второго порядка — в 1.1 раза, третьего — в 1.6 раза, четвёртого — в 1.8 раза и пятого — в 2.5 раза, как на одном процессоре, так и в параллельных расчётах. При увеличении числа Куранта схема Рунге — Кутты проявляет нестабильность, что связано с применением в численной реализации адаптивного шага по времени.

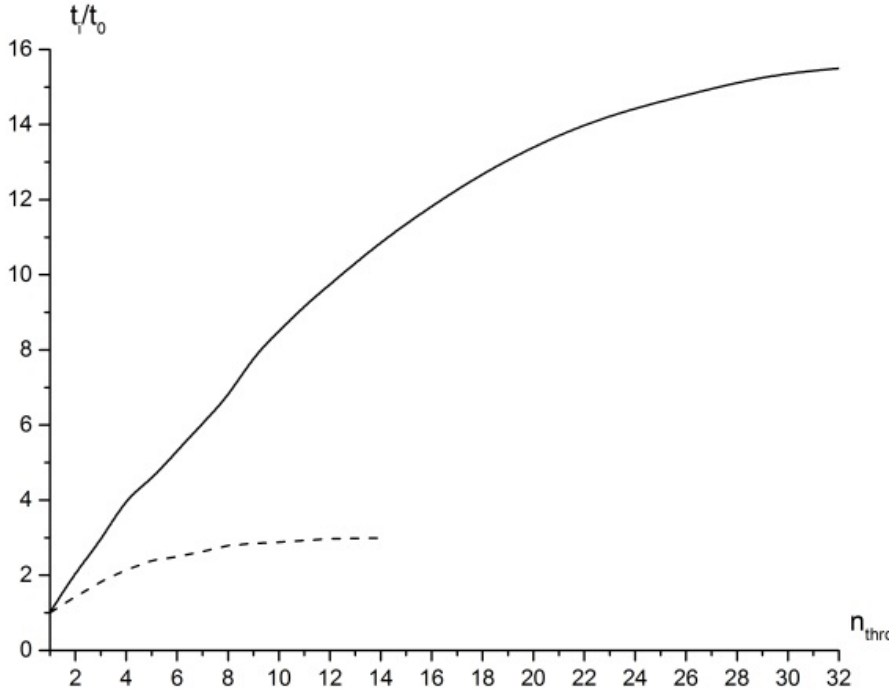

Рис. 3. Зависимость времени счёта тестовой задачи от количества потоков при использовании библиотеки OpenMP. Пунктирная линия — одномерные расчёты, сплошная линия — двумерные расчёты

Сравнение времени расчёта на различном количестве потоков и прирост производительности с увеличением используемых ядер представлен на рис. 3. В двумерной и одномерной постановке эффективность распараллеливания одинакова, а прирост производительности зависит от количества узлов сетки (рис. 3). Для одномерных расчётов происходит выход на экспоненциальное значение при достижении количества используемых ядер более 8 (пунктирная кривая). При распараллеливании для 2D задачи на этом же количестве потоков наблюдается линейный прирост производительности (рис. 3), а эффективный прирост производительности имеет место при решении тестовой задачи на 30 потоках (сплошная линия). Время расчёта по сравнению с исходной программой (без OpenMP) сократилось в 16 раз. Тестирование показало, что в дальнейшем использование программы с подключённой библиотекой OpenMP даёт значительный прирост производительности, и это будет использовано в расчётах.

2. Тестирование механизма горения частиц алюминия

В работах [18; 24; 28] отмечена зависимость скорости детонационной волны от загрузки и от размера частиц. Такое поведение вытекает из формул (1)–(3), зависящих как от размера частиц, так и от соотношения окислителя к горючему. Далее будут приведены результаты по тестированию модели детонации по зависимости от загрузки и размера частиц.

Тестирование модели детонационного горения алюминия проводилось на задаче распространения гетерогенной детонации во взвеси частиц алюминия в воздухе в плоском канале высотой 15 см с различной загрузкой реагирующих частиц диаметром $d = 1$ мкм. Инициирование детонационного горения осуществлялось с помощью камеры высокого давления длиной 3 см с параметрами $p_{\text{КВД}} = 10$ МПа, $T_{\text{КВД}} = 5000$ К. Мембрана камеры имела небольшой наклон для инициирования поперечных волн.

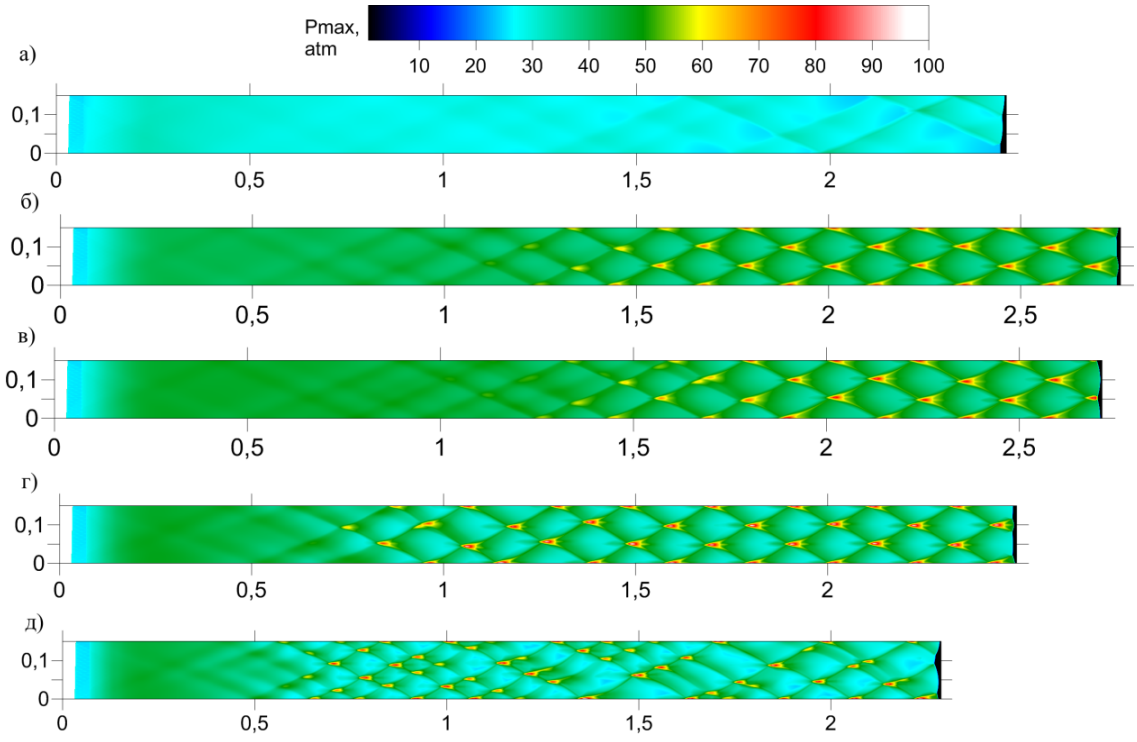

Рис. 4. Картины истории максимального давления при загрузке частиц $\rho_2 = 150$ г/м^3 (а), $\rho_2 = 300$ г/м^3 (б), $\rho_2 = 450$ г/м^3 (в), $\rho_2 = 600$ г/м^3 (г) и $\rho_2 = 750$ г/м^3 (д)

На рис. 4 представлены результаты расчётов в виде картин истории максимального давления ($p_{\max}(x,y) = \max_t(x,y,t)$) на один и тот же момент времени $t = 1.5$ мс. Плотность частиц алюминия варьировалась от $\rho_2 = 150$ г/м^3 (рис. 4, а) до 750 г/м^3 (рис. 4, д). Для малой загрузки частиц видно медленное зарождение слабых поперечных волн. На момент времени $t = 1.5$ мс наблюдается пара поперечных волн, образующих нерегулярную ячеистую структуру с одной ячейкой на ширину канала, и появление малозаметной третьей слабой поперечной волны (рис. 4, а). Скорость распространения фронта составляет $D = 1.51$ км/с. При увеличении плотности частиц до $\rho_2 = 300$ г/м^3 (рис. 4, б) происходит формирование регулярной ячеистой структуры с 1.5 ячейки на ширину канала и скоростью лидирующего фронта порядка $D = 1.66$ км/с. При плотности $\rho_2 = 450$ г/м^3 (рис. 4, в) и $\rho_2 = 600$ г/м^3 (рис. 4, г) ячеистая структура остаётся регулярной с размером ячейки $\lambda \approx 10$ см. Скорость лидирующего фронта составляет 1.63 и 1.48 км/с соответственно. При $\rho_2 = 750$ г/м^3 наблюдается замедление фронта до $D = 1.35$ км/с (рис. 4, д), при этом ячеистая структура становится нерегулярной и составляет 1.5 ячейки на ширину канала. Для всех рассмотренных случаев давление в тройных точках не превышало 100–105 атм. С увеличением загрузки частиц происходит сохранение давления в поперечных волнах на уровне 45–55 атм и снижение давления вне поперечных волн с 40 атм для $\rho_2 = 300$ г/м^3 до 25 атм для $\rho_2 > 600$ г/м^3.

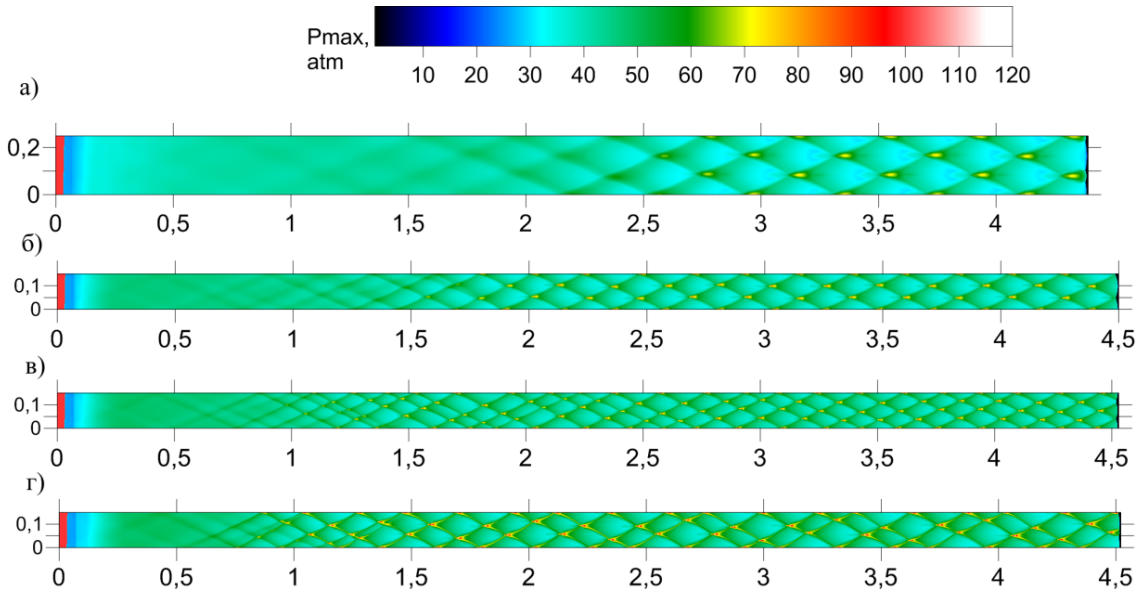

Рис. 5. Картины истории максимального давления при плотности частиц $\rho_2 = 450$ г/м^3 и размере частиц $d_2 = 2$ мкм (а), $d_2 = 1$ мкм (б), $d_2 = 0.6$ мкм (в), $d_2 = 0.3$ мкм (г)

На рис. 5 представлены результаты расчётов для взвеси алюминия в воздухе при плотности частиц $\rho_2 = 450$ г/м^3 и варьировании размера частиц d_2 от 2 до 0.3 мкм. Для частиц менее 1 мкм учитывается увеличение энергии активации (2) согласно [34]. Инициирование детонации осуществлялось с помощью камеры высокого давления с параметрами $p_{\text{КВД}} = 10$ МПа, $T_{\text{КВД}} = 5000$ К. Ширина канала составляла 25 см для $d_2 = 2$ мкм (рис. 5, а) и 15 см — для частиц $d_2 = 0.3$, 0.6 и 1 мкм (рис. 5, б–г). Видно, что с уменьшением размера частиц происходит уменьшение зоны формирования поперечных волн и развития ячеистой детонации. Так, для частиц $d_2 = 2$ мкм (рис. 5, а) ячеистая структура формируется на расстоянии $x = 2.5$ м от начала канала. Формируется ячеистая структура с размером ячейки $\lambda \approx 17$ см. Скорость распространения детонации составляет около 1.73 км/с. Давление в тройных точках составляет около 70–80 атм. Для $d_2 = 1$ мкм (рис. 5, б)

формирование ячеистой структуры происходит на расстоянии $x = 1.5$ м от начала канала. Размер ячейки составляет около $\lambda \approx 10$ см, а скорость фронта немного увеличивается и достигает 1.77 км/с. Давление в тройных точках возрастает до величины 100 атм. Для частиц $d_2 = 0.3$ и 0.6 мкм образование ячеистых структур происходит на расстоянии $x = 1$ м от начала канала. При $d_2 = 0.6$ мкм формируется регулярная ячеистая структура с размером ячейки $\lambda \approx 7.5$ см (рис. 5, в). Для $d_2 = 0.3$ мкм развивается нерегулярная ячеистая структура (рис. 5, г). Это происходит из-за того, что при переходе в субмикронный диапазон энергия активации начинает зависеть от размера частиц (1), (2). Размер ячейки колеблется в диапазоне $\lambda \approx 7$–10 см. Скорость распространения фронта для частиц субмикронного диапазона составляет около 1.79 км/с. Давление в тройных точках колеблется в диапазоне 100–110 атм. Расчёты подтверждают данные других авторов, что на размер детонационной ячейки влияет размер частиц. Для субмикронного диапазона частиц ячеистая структура может становиться нерегулярной, в результате чего определение среднего размера ячейки становится затруднительным.

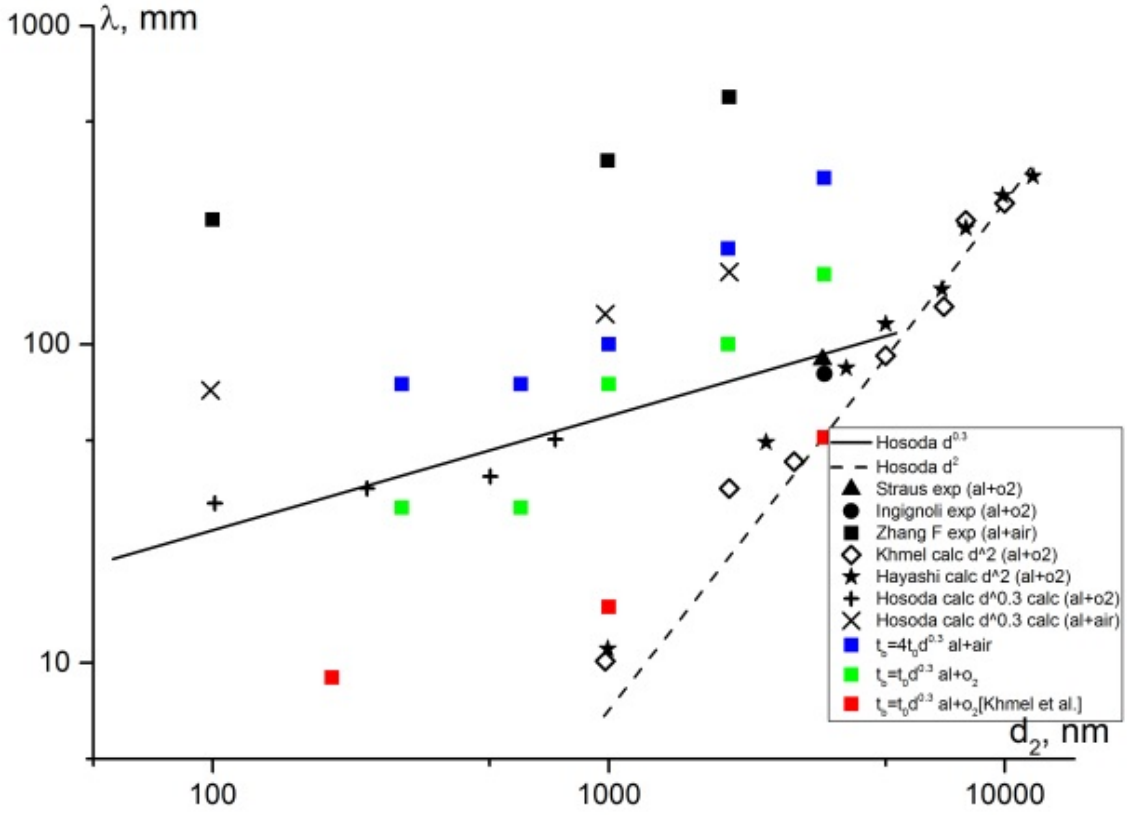

Рис. 6. Сравнение результатов расчётов по размеру детонационной ячейки

Верификация модели по размеру детонационной ячейки в зависимости от диаметра реагирующих частиц приведена на рис. 6 в сопоставлении результатов с данными других авторов. Экспериментальные данные по детонации в чистом кислороде для сферических частиц 3.5 мкм (Ingignoli) обозначены кружками, для хлопьевидных частиц (Straus) — треугольниками, для субмикронного диапазона размеров частиц [18] — плюсами (вдоль данных значений сплошной линией приведена зависимость $d^{0.3}$). Штриховая линия отвечает модели горения в диффузионном режиме d^2 и соотносится с данными [15] (пустые ромбы) и Hayashi [22] (звёзды). Обе модели d^2 и $d^{0.3}$ стыкуются в области $d_2 \approx 3.5$ мкм. Экспериментальные точки Zhang (квадраты) отвечают детонации взвеси алюминия в воздухе в открытом объёме, что объясняет более высокие величины размера ячеек. Согласно [18] (кресты) размер ячейки воздушных смесей больше относительно смесей алюминия в кислороде, что

обусловлено примерно в 4 раза меньшим количеством окислителя и удлинением зоны реакции. С использованием модели, учитывающей переход от диффузионного режима горения к кинетическому [28] (расширенная модель А. В. Федорова и Т. А. Хмель [15] — красные квадраты), размер ячеек уменьшается в сравнении с [18] (плюсы). При использовании представленной в настоящей работе расширенной модели детонационного горения алюминия (1), (2) с энерговыделением согласно модели [41] применительно к кислородным взвесям (зелёные квадраты) получено хорошее совпадение с данными [18] (плюсы). Для воздушных взвесей при увеличении τ_{20} в 4 раза результаты (рис. 6, синие квадраты) хорошо согласуются с результатами [18] для воздуха (кресты).

Сравнение определённой в рамках модели скорости детонационной волны с данными других авторов представлено на рис. 7. Штрих-пунктирной кривой показаны данные термодинамических расчётов в рамках программ [42] и [43]. Можно отметить завышенную (порядка 2.3 км/с) скорость детонационной волны в сравнении с экспериментальной (около 1.6 км/с в работах F. Zhang и др. [44], треугольники, рис. 7). Это можно объяснить тем, что в термодинамических расчётах алюминий считается газообразным, соответственно, модели не учитывают нагрев, плавление и испарение частиц. Результаты расчётов для воздушных взвесей (сплошные кривые) сравнивались с данными [18], где представлены результаты различных авторов. Для частиц 0.3 мкм (чёрная кривая) и 1 мкм (красная кривая) зависимости скорости детонации от загрузки частиц практически совпадают и согласуются с данными термодинамических расчётов [18] (штриховая линия) и данными Борисова и соавторов [45] (кружки). Значения для частиц 3.5 мкм (синяя кривая) находятся в небольшом разбросе с результатами по скорости 0.3 и 1 мкм, но согласуются с данными расчётов [18] (квадраты) и данными [44] (треугольники).

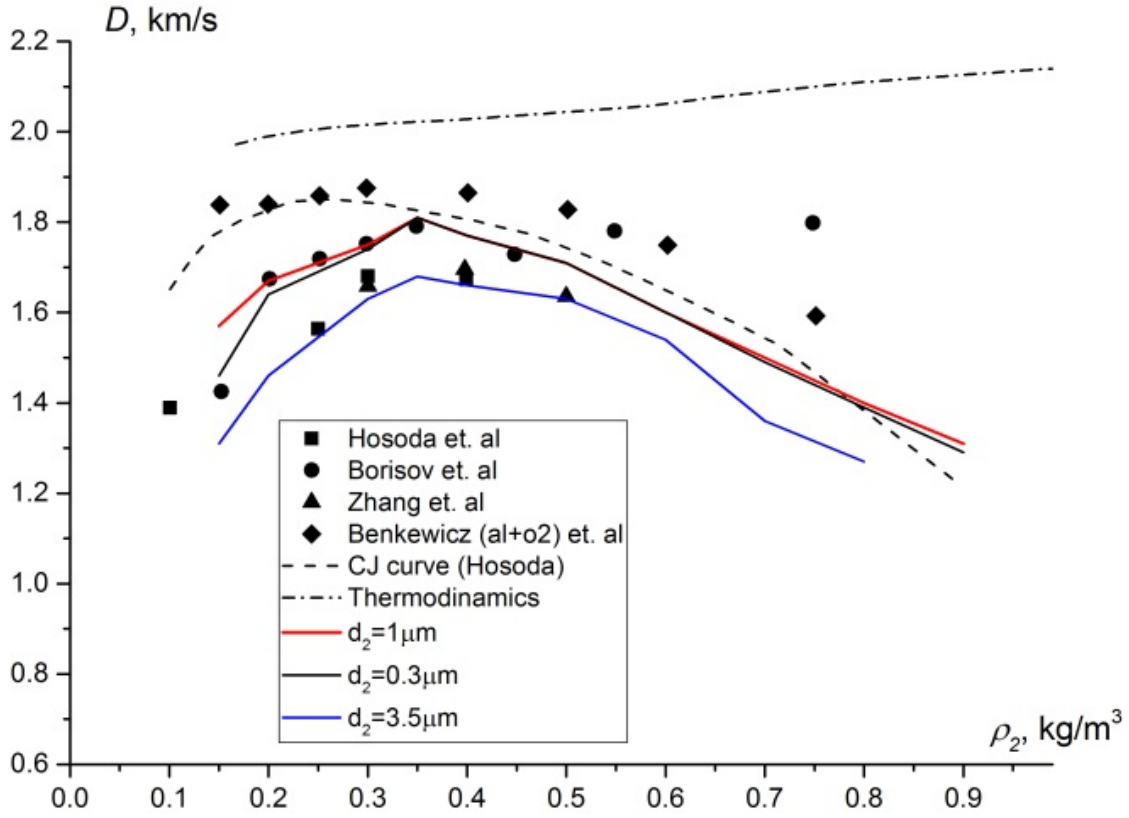

Рис. 7. Сравнение результатов расчётов по скорости детонационной волны

Выводы

Методами численного моделирования проведено тестирование приведённой кинетической схемы детонационного горения частиц алюминия в воздухе, которая учитывает образование газообразных субокислов алюминия и частиц конденсированного оксида алюминия.

Проведено тестирование численного алгоритма с применением методов параллельного программирования на основе библиотеки OpenMP, показавшее ускорение до 16 раз на 30 потоках.

Проведено тестирование численной схемы Рунге — Кутты различных порядков по времени, которое показало оптимальное использование схемы первого порядка с адаптивным временным шагом соответственно условию Куранта.

Проведены расчёты двумерных течений ячеистой детонации взвесей алюминия в воздухе в плоском канале при различных размерах частиц и различной загрузке. Показано, что загрузка частиц в среднем диапазоне концентраций не влияет на размер детонационной ячейки. Нарушение регулярности ячеистой структуры и изменение размера ячейки происходит либо для слишком бедных, либо для слишком богатых газовзвесей частиц. Влияние размера частиц на размер детонационной ячейки согласуется с экспериментальными и расчётными данными других авторов. Сравнение по скорости детонации для взвесей различной дисперсности и различной загрузки показало хорошее согласование с данными других авторов.

Список литературы

1. **Li G., Yang H. X., Yuan C. M., Eckhoff R. K.** A catastrophic aluminium-alloy dust explosion in China // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2016. Vol. 39. P. 121–130.
2. **Taveau J., Hochgreb S., Lemkowitz S., Roekaerts D.** Explosion hazards of aluminum finishing operations // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2018. Vol. 51. P 84–93.
3. **Eckhoff R. K., Li G.** Industrial dust explosions. A brief review // Applied Sciences. 2021. Vol. 11, no. 4. P. 1669.
4. **Khasainov B. A., Veyssiere B.** Steady, plane, double-front detonations in gaseous detonable mixtures containing a suspension of aluminum particles // Dynamics of Explosions. 1988. P. 284–299.
5. **Veyssiere B., Khasainov B. A.** A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension // Combustion and Flame. 1991. Vol. 85, no. 1–2. P. 241–253.
6. **Fedorov A. V.** Structure of the heterogeneous detonation of aluminum particles dispersed in oxygen // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 1992. Vol. 28, no. 3. P. 277–286.
7. **Veyssiere B., Ingignoli W.** Existence of the detonation cellular structure in two-phase hybrid mixtures // Shock Waves. 2003. Vol. 12, no. 4. P. 291–299.
8. **Бекстед М. В.** Анализ данных по времени горения частиц алюминия // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, вып. 5. С. 55–69.
9. **Lynch P., Krier H., Glumac N.** A correlation for burn time of aluminum particles in the transition regime // Proceedings of the Combustion Institute. 2009. Vol. 32, iss. 2. P. 1887–1893.
10. **Briand A., Veyssiere B., Khasainov B. A.** Modelling of detonation cellular structure in aluminium suspensions // Shock Waves. 2010. Vol. 20, no. 6. P. 521–529.

11. **Balakrishnan K., Kuhl A. L., Bell J. B., Beckner V. E.** An empirical model for the ignition of explosively dispersed aluminum particle clouds // Shock Waves. 2012. Vol. 22, no. 6. P. 591–603.
12. **Wu W., Wang Y., Wu K., Ma Z., Han W., Wang J., Wang G., Zhang M.** Experimental evaluation of aluminum powder fuel in a hydrogen/oxygen detonation tube // International Journal of Hydrogen Energy. 2023. Vol. 48, no. 62. P. 24089–24100.
13. **Starik A. M., Savel'ev A. M., Titova N. S.** Specific features of ignition and combustion of composite fuels containing aluminum nanoparticles (Review) // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2015. Vol. 51, no. 2. P. 197–222.
14. **Benkiewicz K., Hayashi A. K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // Shock Waves. 2003. Vol. 12, no. 5. P. 385–402.
15. **Fedorov A. V., Khmel T. A.** Numerical simulation of formation of cellular heterogeneous detonation of aluminum particles in oxygen // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2005. Vol. 41, no. 4. P. 435–448.
16. **Zhang F., Murray S. B., Gerrard K. B.** Aluminum particles-air detonation at elevated pressures // Shock Waves. 2006. Vol. 15, no. 5. P. 313–324.
17. **Veyssiere B., Khasainov B. A., Briand A.** Investigation of detonation initiation in aluminium suspensions // Shock Waves. 2008. Vol. 18, no. 4. P. 307–315.
18. **Hosoda H., Hayashi A. K., Yamada E.** Numerical analysis on combustion characteristics of nano aluiminum particle-oxygen two-phase detonation // Science and Technology of Energetic Materials. 2013. Vol. 74, no. 1–2. P. 34–40.
19. **Хмель Т. А., Лаврук С. А., Афанасенков А. А.** Распространение гибридной детонации в водород-кислородной смеси с частицами алюминия в канале с расширением // Челяб. физ.-мат. журн. 2023. Т. 8, вып. 3. С. 371–386.
20. **Афанасенков А. А., Хмель Т. А.** Валидация модели гибридной детонации водород-воздушных смесей с частицами алюминия // Челяб. физ.-мат. журн. 2024. Т. 9, вып. 2. С. 177–186.
21. **Хмель Т. А., Лаврук С. А.** Моделирование течений ячеистой детонации в смеси водород-кислород-аргон с частицами алюминия // Физика горения и взрыва. 2024. Т. 60, вып. 3. С. 104–116.
22. **Benkiewicz K., Hayashi A. K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // Shock Waves. 2003. Vol. 12, no. 5. P. 385–402.
23. **Sundaram D. S., Yang V., Zarko V. E.** Combustion of nano aluminum particles (Review) // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2015. Vol. 51, no. 2. P. 173–196.
24. **Khmel T. A., Lavruk S. A.** Detonation flows in aluminium particle gas suspensions, inhomogeneous in concentrations // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2021. Vol. 72. P. 104522.
25. **Lavruk S. A., Khmel T. A.** Regimes and critical conditions of detonation propagation in expanding channels in gas suspensions of ultrafine aluminum particles // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2021. Vol. 71. P. 104476.
26. **Fedorov A. V., Khmel T. A.** Cellular detonations in bidispersed gas-particle mixtures // Shock Waves. 2008. Vol. 18, no. 4. P. 277–280.
27. **Lavruk S. A., Fedorov A. V., Khmel T. A.** Cellular detonation propagation and degeneration in bi-disperse gas suspensions of micron- and nano-sized aluminum particles // Shock Waves. 2020. Vol. 30, no. 3. P. 273–286.
28. **Khmel T. A., Lavruk S. A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron aluminum particles with different distributions of concentration // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2022. Vol. 58, no. 3. P. 253–268.

29. **Khmel T. A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron and nanosized aluminum particles // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2019. Vol. 55, no. 5. P. 580–588.
30. **Khmel T. A., Lavruk S. A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of two fractions of aluminum nanoparticles // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2020. Vol. 56, no. 2. P. 188–197.
31. **Tropin D. A., Lavruk S. A.** Physicomathematical modeling of attenuation of homogeneous and heterogeneous detonation waves by clouds of water droplets // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2022. Vol. 58, no. 3. C. 80–90.
32. **Khmel T. A., Lavruk S. A.** Interaction of cellular detonation in aluminum particle suspensions with nonuniform concentrations and clouds of inert particles // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2023. Vol. 59, no. 3. P. 308–320.
33. **Kudryavtsev A. N., Kashkovsky A. V., Shershnev A. A., Kratova Y. V.** Three-dimensional numerical simulation of heterogeneous spin detonation in the Al/O2 gas suspension in channels with a circular cross section // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2023. Vol. 59, no. 1. P. 95–102.
34. **Khmel T. A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron and nanosized aluminum particles // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2019. Vol. 55, no. 5. P. 580–588.
35. **Fedorov A. V., Khmel T. A.** Problems of closing models that describe detonation of gas suspensions of ultrafine aluminum particles (Review) // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2019. Vol. 55, no. 1. P. 1–17.
36. **Bedarev I. A., Rylova K. V., Fedorov A. V.** Application of detailed and reduced kinetic schemes for the description of detonation of diluted hydrogen–air mixtures // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2015. Vol. 51, no. 5. P. 528–539.
37. **Starik A. M., Kuleshov P. S., Sharipov A. S., Titova N. S., Tsai C. J.** Numerical analysis of nanoaluminum combustion in steam // Combustion and Flame. 2014. Vol. 161, no. 6. P. 1659–1667.
38. **Khmel T. A.** Modeling of dynamic processes in dilute and dense gas suspensions (Review) // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2021. Vol. 57, no. 3. P. 257–269.
39. **Harten A.** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // Journal of Computational Physics. 1983. Vol. 49, no. 3. P. 357–393.
40. **Roache P. J.** Computational Fluid Dynamics. Albuquerque : Hermosa Publ., 1976.
41. **Khmel T. A., Lavruk S. A.** Simulation of cellular detonation flow in a hydrogen-oxygen-argon mixture with aluminum particles // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2024. Vol. 60, no. 3. P. 374–385.
42. **Трусов Б. Г.** Программная система TERRA для моделирования фазовых и химических равновесий // Тр. XIV Межд. конф. по хим. термодинамике. 2002.
43. CEARUN [Электронный ресурс]. URL: https://cearun.grc.nasa.gov/ (дата обращения: 10.04.2025).
44. Shock Wave Science and Technology Reference Library. Vol. 4. Heterogeneous Detonation. Berlin, Heidelberg : Springer, 2009.
45. **Borisov A. A., Khasainov B. A., Saneev E. L., Formin I. B., Khomik S. V., Veyssiere B.** On the detonation of aluminium suspensions in air and in oxygen // Dynamic Structure of Detonation in Gaseous and Dispersed Media. Ed. by A. A. Borisov. Dordrecht : Kluwer, 1991. P. 215–253.

Поступила в редакцию 14.04.2025.
После переработки 11.08.2025.

Сведения об авторах

Лаврук Сергей Андреевич, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики имени С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия; e-mail: lavruk@itam.nsc.ru.

Афанасенков Александр Александрович, аспирант, Институт теоретической и прикладной механики имени С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия; e-mail: afanasenkov@itam.nsc.ru.

Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal. 2025. Vol. 10, iss. 4. P. 733–749.

DOI: 10.47475/2500-0101-2025-10-4-733-749

TESTING A MODEL OF DETONATION COMBUSTION OF AIR SUSPENSION OF ALUMINUM PARTICLES

S.A. Lavruk[a], A.A. Afanasenkov

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, Novosibirsk, Russia
[a] lavruk@itam.nsc.ru

The numerical modeling methods were used to test the reduced kinetic scheme of detonation combustion of aluminum particles in air, taking into account the formation of gaseous and condensed aluminum suboxides. The results of testing the numerical algorithm using parallel programming methods and the Runge–Kutta numerical scheme of different orders in time are presented. The results of calculating the cellular detonation of aluminum suspensions in air of different dispersion and loading are presented. It is shown that the degree of regularity of the cellular structure and the cell size are determined by the size and loading of the particles. The detonation velocity depends weakly on the particle size and depends significantly on the loading. The results are in the good agreement with the experimental and calculated data of other authors.

Keywords: *numerical modeling, heterogeneous detonation, gas suspension of aluminum particles, reduced kinetic model.*

References

1. **Li G., Yang H.X., Yuan C.M., Eckhoff R.K.** A catastrophic aluminium-alloy dust explosion in China. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2016, vol. 39, pp. 121–130.
2. **Taveau J., Hochgreb S., Lemkowitz S., Roekaerts D.** Explosion hazards of aluminum finishing operations. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2018, vol. 51, pp. 84–93.
3. **Eckhoff R.K., Li G.** Industrial dust explosions. A brief review. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 4, p. 1669.
4. **Khasainov B.A., Veyssiere B.** Steady, plane, double-front detonations in gaseous detonable mixtures containing a suspension of aluminum particles. *Dynamics of Explosions*, 1988, pp. 284–299.
5. **Veyssiere B., Khasainov B.A.** A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension. *Combustion and Flame*, 1991, vol. 85, no. 1–2, pp. 241–253.
6. **Fedorov A.V.** Structure of the heterogeneous detonation of aluminum particles dispersed in oxygen. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 1992, vol. 28, no. 3, pp. 277–286.
7. **Veyssiere B., Ingignoli W.** Existence of the detonation cellular structure in two-phase hybrid mixtures. *Shock Waves*, 2003, vol. 12, pp. 291–299.
8. **Beckstead M.W.** Correlating aluminum burning times. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2005, vol. 41, no. 5, pp. 533–546.
9. **Lynch P., Krier H., Glumac N.** A correlation for burn time of aluminum particles in the transition regime. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, vol. 32, iss. 2, pp. 1887–1893.

This research was funded by Russian Science Foundation, project number 24-79-00046, https://rscf.ru/project/24-79-00046/.

10. **Briand A., Veyssiere B., Khasainov B.A.** Modelling of detonation cellular structure in aluminium suspensions. *Shock Waves*, 2010, vol. 20, no. 6, pp. 521–529.
11. **Balakrishnan K., Kuhl A.L., Bell J.B., Beckner V.E.** An empirical model for the ignition of explosively dispersed aluminum particle clouds. *Shock Waves*, 2012, vol. 22, no. 6, pp. 591–603.
12. **Wu W., Wang Y., Wu K., Ma Z., Han W., Wang J., Wang G., Zhang M.** Experimental evaluation of aluminum powder fuel in a hydrogen/oxygen detonation tube. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023, vol. 48, no. 62, pp. 24089–24100.
13. **Starik A.M., Savel'ev A.M., Titova N.S.** Specific features of ignition and combustion of composite fuels containing aluminum nanoparticles (Review). *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2015, vol. 51, no. 2, pp. 197–222.
14. **Benkiewicz K., Hayashi A.K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement. *Shock Waves*, 2003, vol. 12, no. 5, pp. 385–402.
15. **Fedorov A.V., Khmel T.A.** Numerical simulation of formation of cellular heterogeneous detonation of aluminum particles in oxygen. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2005, vol. 41, no. 4, pp. 435–448.
16. **Zhang F., Murray S.B., Gerrard K.B.** Aluminum particles-air detonation at elevated pressures. *Shock Waves*, 2006, vol. 15, no. 5, pp. 313–324.
17. **Veyssiere B., Khasainov B.A., Briand A.** Investigation of detonation initiation in aluminium suspensions. *Shock Waves*, 2008, vol. 18, no. 4, pp. 307–315.
18. **Hosoda H., Hayashi A.K., Yamada E.** Numerical analysis on combustion characteristics of nano aluiminum particle-oxygen two-phase detonation. *Science and Technology of Energetic Materials*, 2013, vol. 74, no. 1–2, pp. 34–40.
19. **Khmel T.A., Lavruk S.A., Afanasenkov A.A.** Popagation of hybrid detonation in a hydrogen-oxygen mixture with aluminum particles in a channel with expansion. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2023, vol. 8, iss. 3, pp. 371–386.
20. **Afanasenkov A.A., Khmel T.A.** Validation of the model of hybrid detonation of hydrogen-air mixtures with aluminum particles. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2024, vol. 9, no. 2, pp. 177–186.
21. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Simulation of cellular detonation flow in a hydrogen-oxygen-argon mixture with aluminum particles. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2024, vol. 60, no. 3, pp. 374–385.
22. **Benkiewicz K., Hayashi A.K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement. *Shock Waves*, 2003, vol. 12, no. 5, pp. 385–402.
23. **Sundaram D.S., Yang V., Zarko V.E.** Combustion of nano aluminum particles (Review). *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2015, vol. 51, no. 2, pp. 173–196.
24. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Detonation flows in aluminium particle gas suspensions, inhomogeneous in concentrations. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2021, vol. 72, p. 104522.
25. **Lavruk S.A., Khmel T.A.** Regimes and critical conditions of detonation propagation in expanding channels in gas suspensions of ultrafine aluminum particles. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2021, vol. 71, p. 104476.
26. **Fedorov A.V., Khmel T.A.** Cellular detonations in bidispersed gas-particle mixtures. *Shock Waves*, 2008, vol. 18, no. 4, pp. 277–280.
27. **Lavruk S.A., Fedorov A.V., Khmel T.A.** Cellular detonation propagation and degeneration in bi-disperse gas suspensions of micron- and nano-sized aluminum particles. *Shock Waves*, 2020, vol. 30, no. 3, pp. 273–286.
28. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron aluminum particles with different distributions of concentration. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2022, vol. 58, no. 3, pp. 253–268.

29. **Khmel T.A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron and nanosized aluminum particles. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2019, vol. 55, no. 5, pp. 580–588.
30. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of two fractions of aluminum nanoparticles. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2020, vol. 56, no. 2, pp. 188–197.
31. **Tropin D.A., Lavruk S.A.** Physicomathematical modeling of attenuation of homogeneous and heterogeneous detonation waves by clouds of water droplets. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2022, vol. 58, no. 3, pp. 80–90.
32. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Interaction of cellular detonation in aluminum particle suspensions with nonuniform concentrations and clouds of inert particles. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2023, vol. 59, no. 3, pp. 308–320.
33. **Kudryavtsev A.N., Kashkovsky A.V., Shershnev A.A., Kratova Yu.V.** Three-dimensional numerical simulation of heterogeneous spin detonation in the Al/O2 gas suspension in channels with a circular cross section. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2023, vol. 59, no. 1, pp. 95–102.
34. **Khmel T.A.** Modeling of cellular detonation in gas suspensions of submicron and nanosized aluminum particles. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2019, vol. 55, no. 5, pp. 580–588.
35. **Fedorov A.V., Khmel T.A.** Problems of closing models that describe detonation of gas suspensions of ultrafine aluminum particles (Review). *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2019, vol. 55, no. 1, pp. 1–17.
36. **Bedarev I.A., Rylova K.V., Fedorov A.V.** Application of detailed and reduced kinetic schemes for the description of detonation of diluted hydrogen–air mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2015, vol. 51, no. 5, pp. 528–539.
37. **Starik A.M., Kuleshov P.S., Sharipov A.S., Titova N.S., Tsai C.J.** Numerical analysis of nanoaluminum combustion in steam. *Combustion and Flame*, 2014, vol. 161, no. 6, pp. 1659–1667.
38. **Khmel T.A.** Modeling of dynamic processes in dilute and dense gas suspensions (Review). *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2021, vol. 57, no. 3, pp. 257–269.
39. **Harten A.** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 1983, vol. 49, no. 3, pp. 357–393.
40. **Roache P.J.** *Computational Fluid Dynamics*. Albuquerque, Hermosa Publ., 1976.
41. **Khmel T.A., Lavruk S.A.** Simulation of cellular detonation flow in a hydrogen-oxygen-argon mixture with aluminum particles. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2024, vol. 60, no. 3, pp. 374–385.
42. **Trusov B.G.** Programmnaya sistema TERRA dlya modelirovaniya fazovykh i khimicheskikh ravnovesiy [Program TERRA for modeling phase and chemical equilibrium]. *Proceedings of the XIV International Conference on Chemical Thermodynamics*, 2002. (In Russ.).
43. CEARUN. Available at: https://cearun.grc.nasa.gov/, accessed: 10.04.2025.
44. *Shock Wave Science and Technology Reference Library.* Vol.4. *Heterogeneous Detonation.* Springer, Berlin, Heidelberg, 2009.
45. **Borisov A.A., Khasainov B.A., Saneev E.L., Formin I.B., Khomik S.V., Veyssiere B.** On the detonation of aluminium suspensions in air and in oxygen. *Dynamic Structure of Detonation in Gaseous and Dispersed Media*, ed. by A.A. Borisov. Dordrecht, Kluwer, 1991. Pp. 215–253.

Article received 14.04.2025.
Corrections received 11.08.2025.