

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТЕЧЕНИЯ ДВУХФАЗНОГО ПОТОКА ИЗ СТВОЛА ДЕТОНАЦИОННОЙ УСТАНОВКИ

Зорик И. В.

Об'єктом дослідження є нанесення детонаційних покриттів із застосуванням дешевих і безпечних енергоносіїв без зниження якісних характеристик покриттів. Одним із суттєвих недоліків детонаційно-газового методу, з точки зору безпеки та вартості, є широке використання ацетилен-кисневих сумішей. В деякій мірі застосування пропан-бутанових сумішей вирішує проблему, проте знижуються енергетичні параметри процесу, що обумовлює пошук компромісного рішення – метилацетилен-алленової фракції (МАФ). Цей енергоносієв займає проміжне положення за енергетичними характеристиками і при цьому є стабільним і безпечним. Застосування різних енергоносіїв вимагає детальної інформації про динаміку поведінки продуктів детонації та частинок, що напилуються в стовбурі детонаційної установки. В ході досліджень вирішена задача про розвиток дефлаграційного горіння, переходу в детонацію всередині технологічного каналу установки та руху фронту детонаційної та ударної хвилі на основі рівнянь Нав'є-Стокса з двошаровою моделлю турбулентності Ментера. Для розрахунку багатозональних потоків використовувалася модель об'єму рідини (VOF), яка передбачає, що дві рідини (або фази) або більше не змішуються та не проникають одна в одну. Наведено результати чисельного моделювання процесу витікання продуктів детонації зі стовбура детонаційної установки, а також процесу теплообміну між продуктами згорання та частинками порошку. Визначено швидкості та температури частинок оксиду алюмінію для різних співвідношень МАФ/кисень на виході з технологічного каналу та перед підкладкою. Проведено порівняння результатів чисельного моделювання з даними експериментальних досліджень. Показано, що використана модель адекватно описує процес теплообміну. В результаті проведених досліджень обґрунтовано застосування в якості енергоносія МАФ без зниження якості покриттів з оксидної кераміки. Розроблена математична модель придатна для моделювання процесу з будь-яких поєднань газових компонентів, здатних детонувати.

Ключові слова: детонаційне напылювання, газотермічні покриття, теплообмін в двофазному потоці, математичне моделювання процесів детонації.

1. Введение

Детонационное напыление изначально реализовано американской фирмой Union Carbide в 1950-х годах, которая продолжает заниматься созданием новых запатентованных разработок в данной области [1, 2]. Показано, что в качестве энергоносителей возможно применение ацетилено-кислородных и других смесей углеводородных топлив с окислителем, способных детонировать, например, метан или пропан-бутан. При этом протяжённость зоны перехода процесса горения в детонацию увеличивается, а энергетические характеристики существенно отличаются от ацетилено-кислородных смесей в худшую сторону.

В настоящее время МАФ (метилацетилен-алленовая фракция) находит все большее применение в газовой сварке и резке металлов вместо ацетилена. Поскольку он дешевле и безопаснее и представляет собой смесь метилацетилена (пропина) и аллена (пропадиена), стабилизированную с целью безопасности пропаном, пропиленом, бутаном или другими углеводородами в различных сочетаниях. Однако в литературе практически не рассмотрены детонационные параметры композиционных углеводородных топлив. При детонационном напылении механизм формирования прочносцепленных покрытий в равной степени определяется интенсивностью как термической, так и механической активацией поверхностных слоев соединяемых материалов. Разработка оптимальных технологических процессов

напыления должна выполняться с выбором рационального соотношения между скоростью и температурой напыляемых частиц. Повышение уровня эксплуатационных свойств наиболее нагруженных деталей авиационных двигателей возможно с использованием нескольких подходов, таких как разработка новых материалов, совершенствование способов изготовления, применение новых технологических процессов. А также развитие способов поверхностного упрочнения деталей, применение различных защитных покрытий. Так как эксплуатационные характеристики деталей и узлов авиационных двигателей существенно зависят от характеристик качества поверхности и приповерхностного слоя, актуальным является применение различных типов газотермических покрытий. Таким образом, *объектом исследования* является нанесение детонационных покрытий с применением дешевых и безопасных энергоносителей без снижения качественных характеристик покрытий. *Цель работы* заключается в установлении закономерностей формирования энергетических параметров наносимых порошков (скорость, температура), влияющих на физико-механические свойства поверхностного слоя, в частности адгезионную и когезионную прочность.

2. Методика проведения исследований

В качестве методов исследования в работе использовалось численное моделирование процесса нанесения покрытий и проведение экспериментов.

Анализ исследований двухфазных течений газа с частицами показал, что в последние несколько десятилетий этот вопрос периодически вызывает неизменный интерес. Следует отметить, что большинство расчётов течений несущего газа выполнено на основе системы уравнений Навье-Стокса, осредненных по Рейнольдсу – RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes system) [3], с той или иной моделью турбулентности. Прямое численное моделирование – DNS (Direct Numerical Simulation) предполагает решение полных нестационарных уравнений Навье-Стокса и уравнения неразрывности. Таким образом, не требуется дополнительного моделирования и происходит учет всех эффектов присущих течению. Трудности DNS заключаются в ограниченности компьютерных ресурсов даже в настоящее время. В последнее время появляются работы, в которых используются методы типа: моделирование крупных вихрей – LES (Large Eddy Simulation), моделирование отсоединённых вихрей – DES (Detached Eddy Simulation) и их модификации [4, 5], которые требуют значительных вычислительных ресурсов.

Кроме DES и LES существует множество систем уравнений Навье-Стокса, осредненных по Рейнольдсу, которые обладают как достоинствами (относительно невысокие требования к вычислительным ресурсам), так и существенными недостатками – ограниченной областью применения. Одна из распространенных моделей $k-\omega$ типа, предложенная Вилкоксом [6] дает хорошее описание $k-\omega$ моделью пристеночных течений с отрывом пограничного слоя.

Для моделирования широкого спектра турбулентных течений наиболее распространенными в настоящее время являются $k-\varepsilon$ модели за счет достаточно хорошей сходимости и точности. Однако они имеют ограниченную область применения, так как плохо описывают течения с сильной кривизной потока, закрученные потоки, течения с отрывом, вторичные течения, пристеночные течения. Преимущества $k-\varepsilon$ моделей при описании течений и $k-\omega$ при описании пристеночных функций были реализованы в двухслойной модели Ментера [7]. Для этого $k-\varepsilon$ модель была записана в терминах k и ω , а затем в полученные модельные уравнения была введена весовая функция F_1 , обеспечивающая плавный переход от $k-\omega$ модели в пристеночной области к $k-\varepsilon$ модели вдали от стенки. Функция F_1 подбирается таким образом, чтобы быть равной нулю на верхней границе пограничного слоя и стремиться к единице при приближении к стенке. Также в модели Ментера видоизменена стандартная связь между кинетической энергией k , скоростью диссипации ε и турбулентной вязкостью t_μ . Для связи вводится специальная ограничительная функция – SST (shear stress transport) – перенос сдвиговых напряжений.

Процесс горения газообразных топливных смесей с переходом с дефлаграционного в детонационный режим сгорания, с определением температурных полей, скоростей, концентраций компонентов с учетом кинетики процесса, является достаточно сложным как для экспериментального исследования, так и для математического моделирования.

Согласно данным производителя [8], МАФ представляет собой смесь компонентов, представленных в табл. 1.

Таблица 1
Состав метилацетилен-алленовой фракции (МАФ)

Компоненты	Химическая формула	Объемная доля, %	Среднее значение	Молярная масса углеводорода, г/моль	Вес компонента /кислорода	С учетом % содержания в МАФ
Метилацетилен (пропин)	C_3H_4 ($CH_3C\equiv CH$)	38,0–47,1	72,5	40,06386	40,06386/ 127,9952	29,0462985/ 92,79652
Аллен (1,2-пропадиен)	C_3H_4 ($CH_2=C=CH_2$)	27,8–37,0				
Пропан	C_3H_8	14,6–24,2	18,5	44,09562	44,09562/ 159,994	8,1576897/ 29,59889
Пропилен (пропен)	C_3H_6	0,8–10,4	5,5	42,07974	42,07974/ 143,9946	2,3143857/ 7,919703
Углеводороды C4	C_4H_{10}	1,0–6,0	3,5	58,1222	58,1222/ 31,9988	2,034277/ 1,119958
Ацетонитрил, не более	–	0,5	–	–	–	–

Кинетика рассчитывается по глобальному механизму. Для этого приняты следующие брутто-уравнения горения углеводородов: $C_3H_4+4O_2=2H_2O+3CO_2$, $C_3H_8+5O_2=3CO_2+4H_2O$, $2C_3H_6+9O_2=6CO_2+6H_2O$, $C_4H_{10}+O_2=CH_3COOH+H_2O$.

Для определения стехиометрического соотношения МАФ/кислород необходимо рассчитать молярные массы для каждого из компонентов брутто реакций. Таким образом, стехиометрическое соотношение: $0,316=41,55/131,43$, а эквимольное: $1,298=41,55/31,99$.

Расчетная область представляет собой ствол длиной 1700 мм и диаметром 24 мм частично заполнен газовой смесью, способной детонировать при начальных давлениях, плотности и температуре. На срезе ствола идет существенное увеличение размеров расчетной области, с параметрами газа равным атмосферному давлению и температуре. Таким образом, характер истечения для обеспечения условий близких к реальным параметрам истечения продуктов детонации. На расстоянии 120 мм расположена плоская преграда, имитирующая подложку. Для уменьшения времени расчета модель, так как она осесимметрична, представлена в эквивалентной двухмерной форме.

3. Результаты исследований и обсуждение

В результате проведенных расчетов в среде ANSYS Fluent получены значения температур, скорости, давления по времени, в зависимости от содержания топлива во взрывчатой смеси (рис. 1).

Рассчитаны скорости и температуры порошковых материалов и показаны в характерных точках – на срезе ствола и непосредственно перед мишенью. Истечение продуктов детонации после прохождения ударной и детонационной волн, в момент времени $t=0,036$ с после инициирования, можно качественно проанализировать на рис. 2–4.

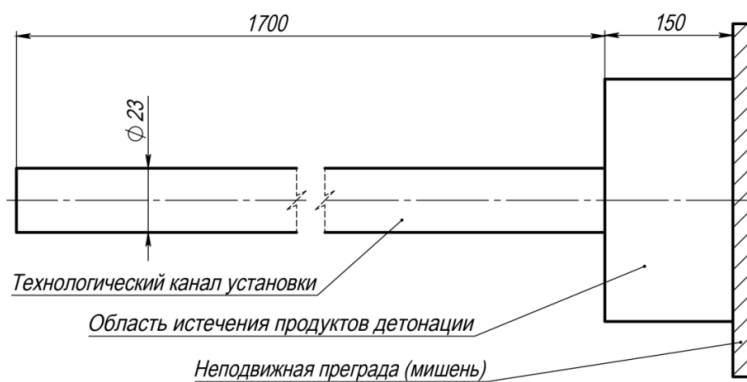


Рис. 1. Расчетная схема истечения продуктов детонации из ствола детонационной установки



Рис. 2. Распределение полей температур по каналу ствола установки



Рис. 3. Распределение полей давлений по каналу ствола установки



Рис. 4. Распределение полей скоростей продуктов детонации по каналу ствола

Пример расчета приведен для стехиометрического соотношения детонирующей смеси МАФ-кислород.

Распределение газодинамических параметров представлено на рис. 5–7.

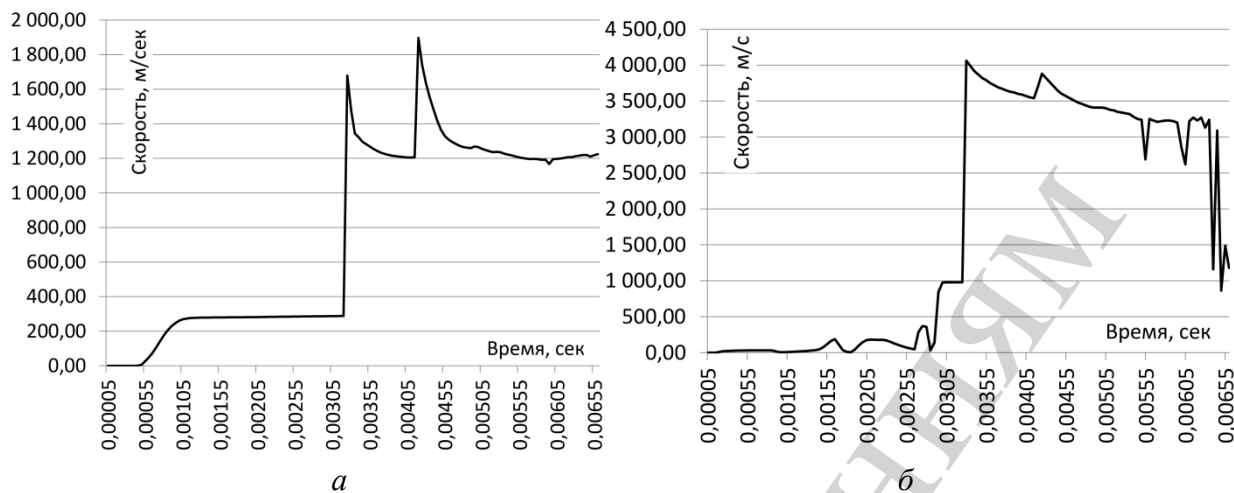


Рис. 5. Параметры скорости истечения продуктов детонации: а – срез ствола; б – у преграды

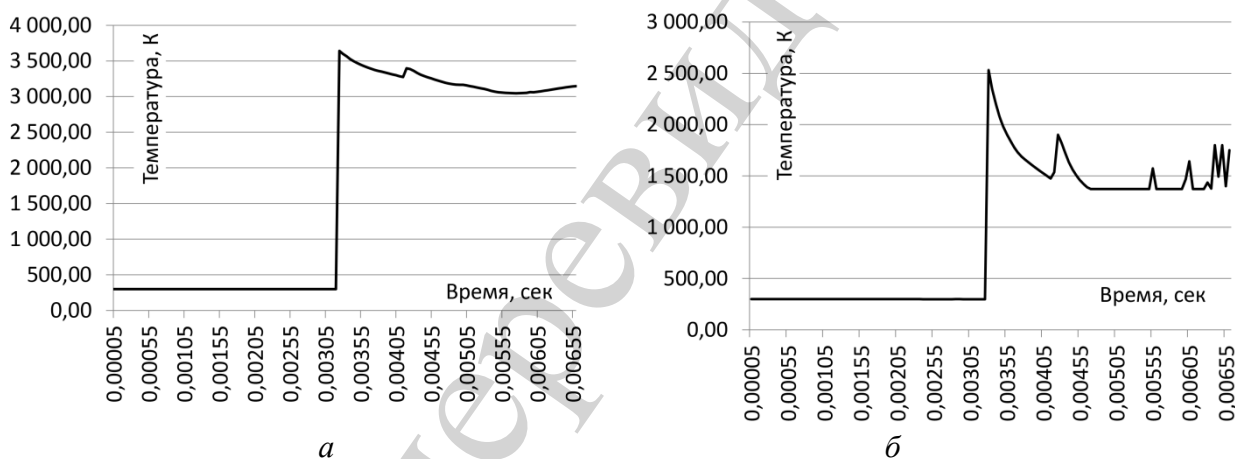


Рис. 6. Параметры температуры продуктов детонации: а – срез ствола; б – у преграды

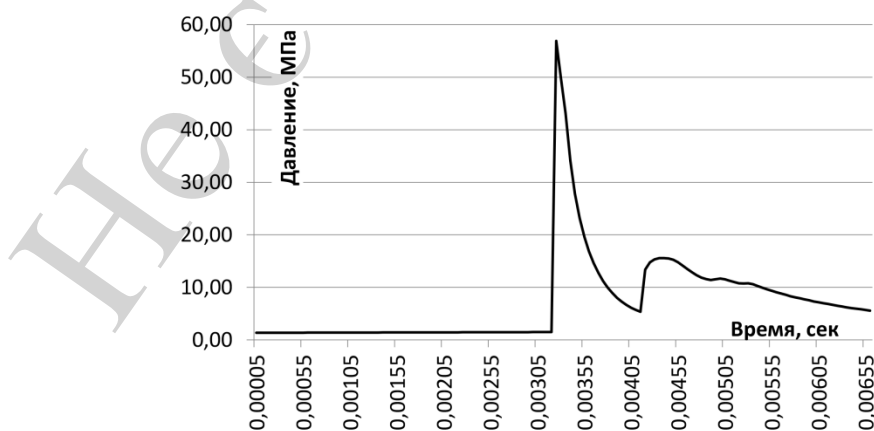


Рис. 7. Параметры давления на срезе ствола детонационной установки

Для определения скорости и температуры частиц наносимого порошкового материала на срезе ствола и перед мишенью, навеска порошка вводится в технологический канал установки: заданной фракции, на заданном расстоянии 800 мм от среза ствола. В частности, на рис. 8, 9 представлены графики для частиц Al_2O_3 фракцией 20 мкм, величиной навески 0,2 г.

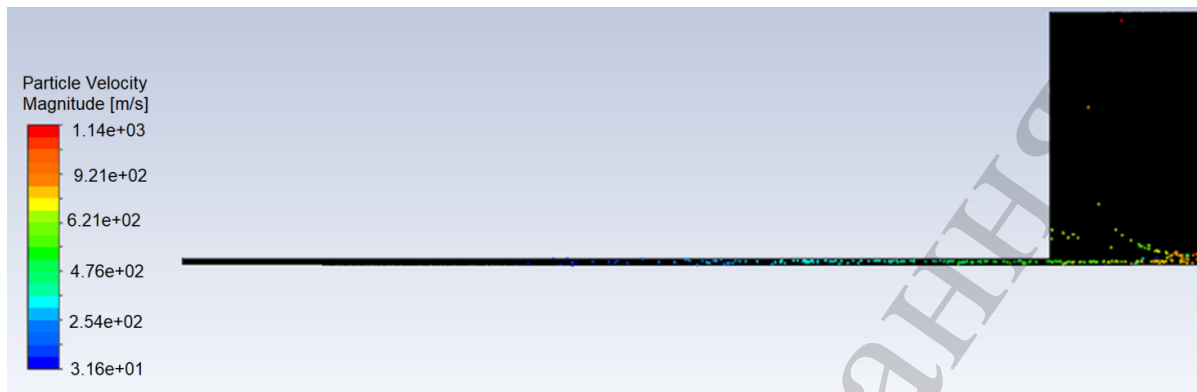


Рис. 8. Распределение скоростей частиц по каналу ствола установки при $t=0,007$ с

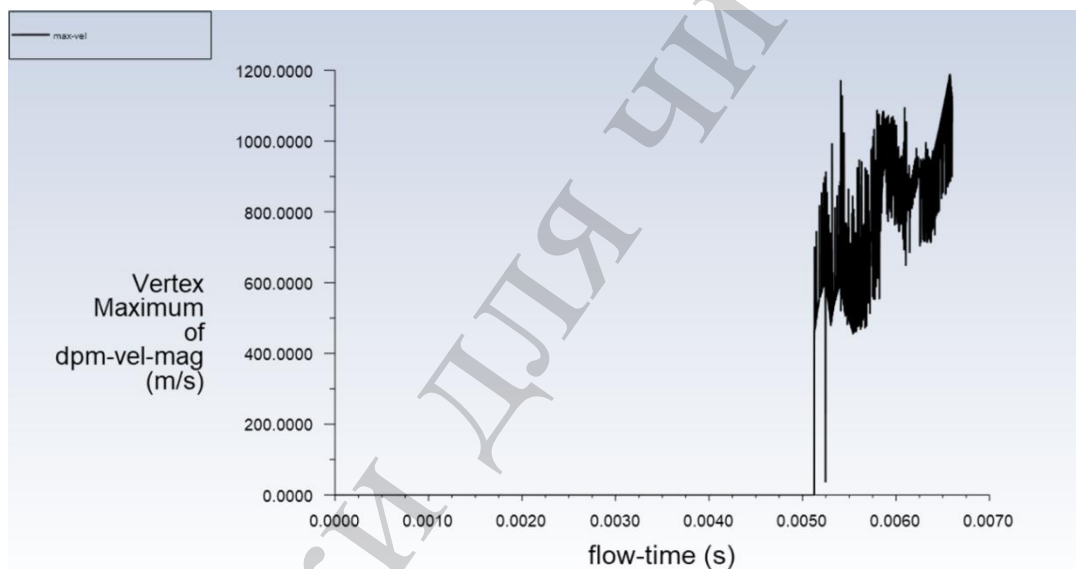


Рис. 9. Распределение скоростей ансамбля частиц на срезе ствола

Для расчета многофазных потоков используют два подхода: метод Эйлера-Лагранжа и метод Эйлера-Эйлера. В концепции однородного многофазного моделирования Эйлера обе модели – модель объема жидкости (VOF) и модель смеси Эйлера – решают один тот же набор управляющих уравнений для смеси (осредненной). Однако в их основе лежат различные физические механизмы, и поэтому они применяются к различным многофазным режимам потока. Модель смеси – предназначена для двух или более фаз (жидкость или твердые частицы), которые обрабатываются как взаимно проникающие континуумы. Формулировка VOF [9] предполагает, что две жидкости (или фазы) или более не смешиваются и не проникают друг в друга. Поэтому в любой заданной ячейке контрольного объема по доле объемов локальных фаз можно определить, содержит ли ячейка только одну из фаз или смесь фаз.

На рис. 8, 9 с указанием скоростей ансамбля частиц показаны частицы, отлетающие от мишени, так как в модели не задавалось взаимодействие частиц с подложкой и они рикошетили от мишени, а скорости определялись на срезе ствола и перед мишенью. Картина значений скоростей частиц перед преградой не изменяется качественно, однако, для данной

навески порошка численные значения уменьшаются примерно на 20 %. Присутствующий эффект уменьшения скорости частиц достаточно легко объясняется при анализе распределения полей скоростей и давлений продуктов детонации. Непосредственно по оси ствола перед преградой наблюдается рост давления и падения скорости, поток тормозится и частицам приходится преодолевать застойную зону.

Несмотря на все большее распространение МАФ в промышленности, в литературных источниках практически отсутствуют данные о скорости распространения детонации для МАФ-кислородных смесей. Таким образом, для верификации модели расчетные данные можно сравнить с экспериментальными значениями, а также дополнительно было проведено моделирование для ацетилен-кислородных смесей с различными соотношениями газовых компонентов для сравнения с известными [10].

На основании проведенных расчетов определены зависимости скорости и температуры от соотношения компонентов газовой смеси (рис. 10).

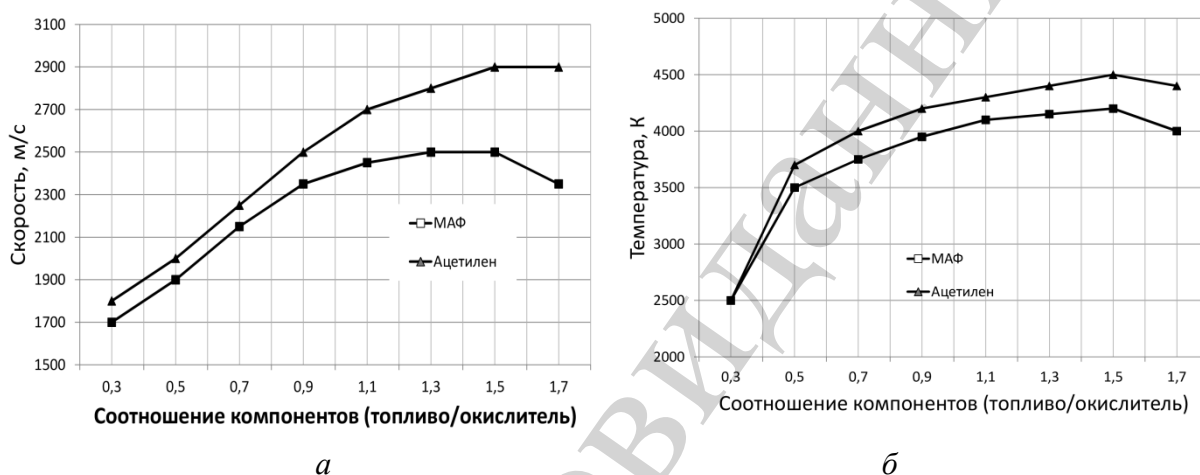


Рис. 10. Зависимости энергетических параметров от соотношения компонентов газовой смеси: *а* – скорость; *б* – температура

Для подтверждения расчетных значений скорости распространения детонационной волны была предложена и использована следующая схема стенда (рис. 11, *а*). На окончание технологического канала детонационной установки устанавливалась дополнительная секция с перпендикулярными ответвлениями, в которые монтировались высокоскоростные фотодатчики, реагирующие на прохождение детонационной волны. Это позволяет по смещениям во времени прохождения всплесков на первом и втором каналах определить фактические скорости. За срезом ствола меняется характер истечения, происходит расширение продуктов детонации и изменение скорости. Для измерения скорости за пределами технологического канала использована другая схема измерений (рис. 11, *б*), основанная на тех же принципах и элементной базе, что и на срезе ствола.

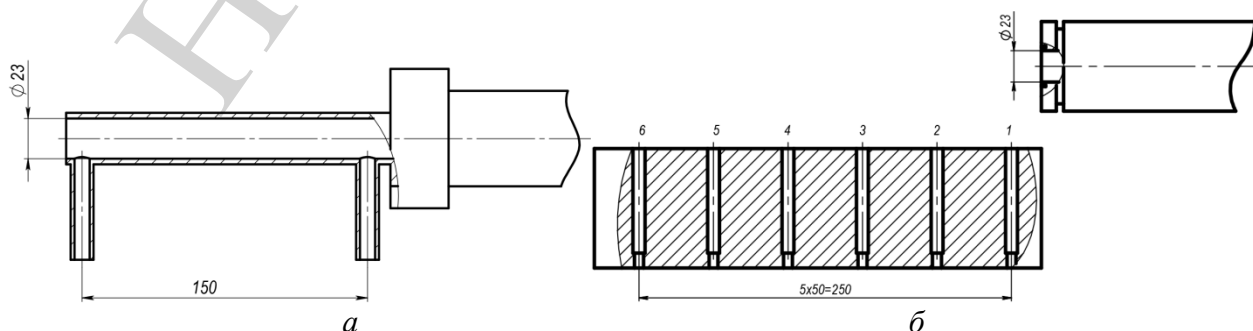


Рис. 11. Схема измерительного стенда: *а* – на срезе ствола; *б* – за срезом ствола

В случае измерений скорости за срезом используется приспособление, в котором могут быть установлены высокоскоростные фотодатчики на расстоянии 50 мм. Датчики устанавливаются по нижнему торцу на глубине 60 мм, для снижения погрешности при прохождении разогретых частиц имеющих светимость (рис. 12).

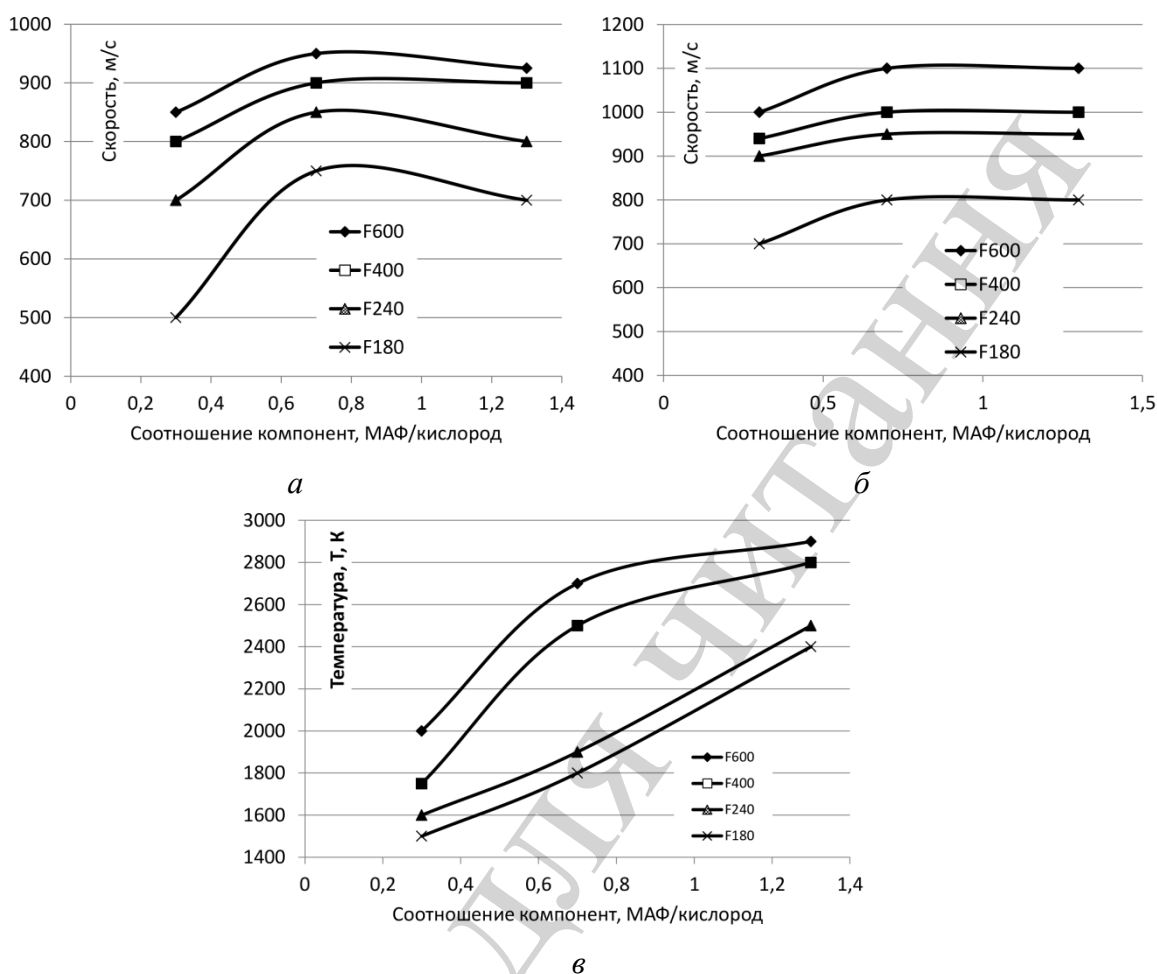


Рис. 12. Значения скорости и температуры частиц порошка Al_2O_3 : *a* – скорость на срезе ствола; *б* – скорость перед преградой; *в* – температура на срезе ствола

Сравнение результатов моделирования, представленных на рис. 12, с экспериментальными данными показывает их достаточно хорошее совпадение (с погрешностью до 7 %).

4. Выводы

В работе рассмотрена задача моделирования процесса разгона и нагрева порошковых материалов импульсными методами. Разработана математическая модель для численного моделирования и проведены расчеты в среде ANSYS Fluent. К недостаткам следует отнести характерный для конечно-элементного анализа большой объем вычислений. Однако этот недостаток компенсируется возможностью детального описания процесса теплообмена и разгона порошкового материала в технологическом канале без каких-либо существенных упрощений, что позволяет оценить действительную картину процесса. Еще одно достоинство модели – доступность информации о распределении температур в любой точке моделируемого объекта в любой момент времени.

Оценена адекватность используемой модели для смесей МАФ-кислород, с погрешностью в пределах 7 %. Результаты расчетов показали, что энергетические параметры меняются незначительно, по сравнению с ацетилен-кислородными смесями, скорость снижается на 400 м/с, а падение температуры потока незначительно, не более чем 250 градусов и не

окажет существенного влияния на разогрев частиц порошка. Кроме того, расчетные значения скорости до 1000 м/с и температуры до 2800 К позволяют говорить о достаточности для формирования прочносцепленных покрытий из оксидной и карбидной керамики.

Результаты исследований будут полезны при совершенствовании технологии нанесения газотермических покрытий детонационно-газовым методом.

References

1. De Souza, V., Neville, A. (2003). Corrosion and erosion damage mechanisms during erosion–corrosion of WC–Co–Cr cermet coatings. *Wear*, 255 (1-6), 146–156. doi: [http://doi.org/10.1016/s0043-1648\(03\)00210-2](http://doi.org/10.1016/s0043-1648(03)00210-2)
2. Tucker, R. C. (1995). Plasma Spray, Detonation Gun, and HVOF Deposition Techniques. *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering*, 245–284. doi: http://doi.org/10.1007/978-94-011-0077-9_7
3. Yun, A. (2005). *Development and Analysis of Advanced Explicit Algebraic Turbulence and Scalar Flux Models for Complex Engineering Configurations*. Darmstadt. Available at: <https://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/epda/000579/>
4. Spalart, P. R., Deck, S., Shur, M. L., Squires, K. D., Strelets, M. K., Travin, A. (2006). A New Version of Detached-eddy Simulation, Resistant to Ambiguous Grid Densities. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 20 (3), 181–195. doi: <http://doi.org/10.1007/s00162-006-0015-0>
5. Wegner, B., Maltsev, A., Schneider, C., Dreizler, A., Sadiki, A., Janicka, J. (2003). Evaluation of URANS performance in Predicting an Unconfined Swirling Flow with Precessing Vortex core based on LES and Experiments. *TSFP3, Sendai*, 1, 51–56.
6. Wilcox, D. C. (1994). *Turbulence Modeling for CFD*. California. Available at: https://www.academia.edu/1160786/Turbulence_modeling_for_CFD
7. Menter, F. (1993). Zonal Two Equation k-w Turbulence Models For Aerodynamic Flows. *23rd Fluid Dynamics, Plasmadynamics, and Lasers Conference*. doi: <http://doi.org/10.2514/6.1993-2906>
8. *Metilacetilen-allenovaya frakciya (MAF)*. Available at: https://tgko.ru/spravka/gaz/metilacetilen_allenovaya_frakciya_maf/
9. Katopodes, N. D. (2019). Volume of Fluid Method. *Free-Surface Flow*, 766–802. doi: <http://doi.org/10.1016/b978-0-12-815485-4.00018-8>
10. Boguslaev, V. A., Dolmatov, A. I., Zhemaniuk, P. D., Kulagin, A. I., Mikhailutsa, V. G., Simonenko, V. A. (1996). *Detonatsionnoe nanesenie pokrytii na detali aviadvigatelei i tekhnologicheskogo osnashcheniia s posleduiushchei magnit-noabrazivnoi obrabotkoi*. Zaporozhe: Izd. OAO «Motor Sich», 75–104.