

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2019 г. по 30.06.2020 г.

по проекту **«Разработка фундаментальных физико-математических моделей межфазного физико-химического взаимодействия нанодисперсных органических и металлических частиц с реагирующими и инертными средами»**, поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 17-79-20011

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Моисеева Ксения Михайловна

За три года выполнения проекта реализованы все поставленные перед коллективом задачи. Выполнены все обязательства по публикациям результатов работы в изданиях, индексируемых Scopus.

Были получены следующие научные результаты.

1. Разработан ряд физико-математических моделей, алгоритмов и средств реализации алгоритмов расчета задач воспламенения и горения газозвесей органических и металлических порошков и проведено численное исследование процессов горения газозвесей. Физико-математические модели основаны на модели динамики многофазных реагирующих сред и в зависимости от описываемого процесса записаны в приближении изобарического процесса, в этом случае постановка задачи описывается тепло-диффузионной моделью горения и с учетом переменного по пространству давления, в этом случае используется газодинамическая постановка задачи. В ходе выполнения проекта проведена валидация физико-математических моделей путем сопоставления полученных результатов с экспериментальными данными из научной литературы. Подобраны кинетические константы реакций и записаны законы горения частиц, позволяющие с хорошей точностью воспроизводить экспериментальные данные.

2. В части исследования горения органических пылей получены результаты, касающиеся влияния состава смеси, а также условий прохождения процессов воспламенения и горения на критические условия искрового зажигания и скорость горения газозвеси угольной пыли. Показано влияние состава угольной пыли на характеристики течения и горения газозвеси угольной пыли в закрученном канале Swiss-roll burner. Определено влияние лучистого теплопереноса на минимальную энергию искрового зажигания аэрозвеси угольной пыли. Показано, что выход летучих компонентов из частиц угольной пыли начинает играть существенную роль при зажигании сильно запыленных сред. Показано, что для слабо запыленных смесей (с концентрацией меньше 0.4–0.3 кг/м³) присутствие летучих компонентов, наоборот, приводит к увеличению минимальной энергии искрового зажигания. Показано, что параметры угольной пыли (массовая концентрация и размер частиц пыли, а также процентное содержание летучих компонентов в частицах) влияют на видимую скорость распространения фронта горения. Для бидисперсной взвеси угольной пыли показано, что с увеличением доли крупных частиц во взвеси скорость горения уменьшается. При горении монодисперсной взвеси угольной пыли в метано-

воздушной смеси при малых массах пыли (0.15 кг/м^3) аэрозоль частиц с меньшим содержанием летучих компонентов горит быстрее. Увеличение массы пыли до 0.3 кг/м^3 приводит к изменению в характере зависимости скорости горения от содержания летучих компонентов – взвесь с большим содержанием летучих компонентов горит с большей скоростью. Увеличение процентного содержания метана в смеси приводит к уменьшению видимой скорости распространения пламени. Решена задача горения в замкнутом объеме аэрозоли угольной пыли, выделяющей летучие компоненты при нагреве. Получено, что на начальном этапе воспламенения смеси скорость горения выше у взвеси с меньшим содержанием летучих компонентов в частицах, далее, за счет того, что летучие не растягиваются по пространству за счет диффузии, а накапливаются в замкнутом объеме, скорость горения газовой взвеси с частицами, содержащими большее количество летучих, возрастает. Таким образом, работает предположение о снижении скорости горения газовой взвеси угольной пыли в открытом канале за счет диффузии выделившихся летучих компонентов от зоны воспламенения. Наибольшую скорость горения для заданных условий имеет газовая взвесь с большим содержанием метана. При малых массовых концентрациях угольной пыли частицы, содержащие большее количество летучих, требуют большего количества энергии в очаге зажигания. Получено, что в зависимости от условий воспламенения и горения возможны разные варианты влияния выхода летучих компонентов на скорость горения газовой взвеси угольной пыли.

3. Получены данные об особенностях окисления и горения одиночной частицы алюминия, в том числе, покрытой никелем. Проведен расчет скорости нарастания слоя оксида алюминия на поверхности наночастицы при хранении в воздухе. Показано, что частицы размером 160 нм за 35 лет окисляются на 25 %, частицы размером 80 нм окисляются на 41 %. Проведены расчеты времени сгорания наноразмерных частиц алюминия в высокотемпературной среде окислителя и изменения массы алюминия в наноразмерных частицах алюминия в процессе хранения на воздухе при нормальных условиях. Зависимость времени сгорания частицы алюминия от температуры окружающего газа совпадает с данными измерений, представленных в научной литературе. Рассчитанные по модели величины процентного содержания алюминия в наночастице на моменты времени 6 месяцев и 6 лет совпали с экспериментальными данными из литературы (при окислении на воздухе наночастиц алюминия ALEX через 6 месяцев в частице содержится чистого алюминия 88 %, через 6 лет – 85%). Получена зависимость времени сгорания частицы алюминия от начальных давления и температуры и от диаметра частиц. Показано, что увеличение давления и температуры приводит к уменьшению времени сгорания, увеличение диаметра частиц приводит к увеличению времени сгорания. Проведено исследование времени сгорания наноразмерных частиц алюминия, покрытых никелем. Получено, что для частиц диаметром 80 нм время сгорания покрытых никелем частиц меньше, чем непокрытых. С увеличением размера частиц и с увеличением температуры окружающего газа наблюдается обратное соотношение этих времен. Разработана модель горения аэрозоли наноразмерного порошка алюминия с использованием диффузионного подхода к моделированию горения частиц алюминия, 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 аэрозвеси. Показано, что с увеличением начальной температуры и массовой концентрации порошка скорость распространения фронта горения увеличивается. Решена задача горения аэрозоля суспензии нанопорошка алюминия в керосине. Определены зависимости скорости распространения фронта горения от массовой концентрации керосина, нанопорошка алюминия и от начальной температуры аэрозоля. Расчетная скорость распространения фронта горения в аэрозоле чистого керосина в зависимости от массовой концентрации керосина и начальной температуры хорошо согласуется с экспериментальными данными. Решена задача о скорости горения аэрозвеси порошка алюминия с учетом переменности давления. Показано, что массовая концентрация и размер частиц алюминия влияют на видимую скорость распространения фронта горения. Увеличение размера частиц приводит к уменьшению видимой скорости распространения фронта горения, при этом скорость горения стремится к одному и тому же значению, не зависящему от размера частиц. Для бидисперсной аэрозвеси показана зависимость скорости горения порошка алюминия от доли частиц крупной фракции во взвеси. При одинаковых массовых долях крупной и мелкой фракции частиц в порошке скорость горения бидисперсного порошка по значениям ближе к скорости горения монодисперсной аэрозвеси мелких частиц. Результаты расчета соответствуют известным экспериментальным данным. Решена задача искрового зажигания порошка алюминия. Расчеты минимальной энергии искрового зажигания монодисперсной аэрозвеси порошка алюминия показали, что для частиц радиуса меньше 0.6 мкм минимальная энергия искрового зажигания слабо зависит от массовой концентрации при стремлении коэффициента избытка окислителя к единице (стехиометрическая смесь с массовой концентрацией частиц алюминия 0.274 кг/м³). Для крупных частиц наблюдается существенная зависимость минимальной энергии искрового зажигания от массовой концентрации частиц. Расчеты задачи минимальной энергии искрового зажигания бидисперсной аэрозвеси порошка алюминия показали, что для частиц алюминия в диапазоне 0.2–4 мкм при увеличении массовой концентрации порошка алюминия в сторону стехиометрического состава минимальная энергия искрового зажигания получает слабую зависимость от массовой концентрации порошка. При этом снижается зависимость минимальной энергии искрового зажигания от размера частиц и распределения частиц по фракциям. Присутствие мелкодисперсной фракции частиц существенным образом сказывается на минимальной энергии искрового зажигания с выходом горения на устойчивый режим. В присутствии мелкодисперсной фракции частиц минимальная энергия искрового зажигания бидисперсной аэрозвеси порошка алюминия значительно уменьшается по сравнению с минимальной энергией искрового зажигания монодисперсной аэрозвеси с крупными частицами. Решена задача горения замороженной водяной суспензии наноразмерного порошка алюминия (ALICE) с использованием двух подходов к описанию горения частиц алюминия: по модели А.Ф. Беляева и по диффузионной модели. Уточнение модели бидисперсного порошка ALICE с учетом диффузионной модели для наноразмерных частиц и модели А.Ф. Беляева для частиц

микронных размеров позволяет достаточно хорошо воспроизводить результаты экспериментальных исследований.

4. Получены данные по линейным скоростям горения 7 составов металлизированного смесового твердого топлива в предположении отсутствия агломерации в смеси. Согласно полученным результатам для заданных условий расчета увеличение массовой доли алюминия в составе СТТ приводит к уменьшению скорости горения. Увеличение массовой доли ПХА в составе СТТ при заданной массовой доле алюминия приводит к увеличению линейной скорости горения. С учетом процессов агломерации была рассчитана линейная скорость горения бидисперсного порошка алюминия с радиусом частиц 3 и 70 мкм. Проведено исследование влияния массового соотношения между фракциями частиц алюминия на линейную скорость горения топлива. Показан переход от скорости горения 15.9 мм/с при 100% содержании порошка алюминия 3 мкм к скорости горения 8 мм/с при 100% содержании крупного порошка 70 мкм. Решена задача горения металлизированного смесового твердого топлива, содержащего полидисперсный порошок алюминия. Разработана методика восстановления данных об исходном составе порошка на основе данных о продуктах горения. Определены механизмы влияния добавок порошков алюминия на скорость горения смесовых твердых топлив на основе перхлората аммония. Получены эмпирические функции распределения частиц алюминия по размерам на выходе с поверхности горения при различных давлениях. Предложена методика расчета скорости горения смесового твердого топлива на основе перхлората аммония с добавлением наноразмерного порошка алюминия, позволяющая проводить расчет скорости горения, удовлетворительно согласующийся с данными экспериментальных измерений. Показана возможность использовать данные отбора частиц алюминия продуктов сгорания при одном давлении для расчета скорости горения по модели в широком диапазоне давлений. Проведены расчеты нестационарной скорости горения твердых ракетных топлив при резком сбросе давления в камере сгорания. Проведено моделирование погасания МСТТ при резком сбросе давления. Получены границы погасания топлива при сбросе давления. Из расчетов получено, что металлизированное СТТ продолжает гореть при большей глубине падения и большей скорости уменьшения давления, чем СТТ без примеси порошка алюминия. С уменьшением размера частиц алюминия, вылетающих в газовую фазу с поверхности МСТТ, оно продолжает гореть при большей глубине падения и большей скорости уменьшения давления. Сделан вывод о том, что наличие алюминиевого порошка в составе СТТ повышает устойчивость его горения при резких уменьшениях давления над поверхностью горения.

5. Исследованы закономерности воспламенения и скорость горения газозвеси смеси порошков алюминия и бора. Предложен механизм окисления и горения частицы бора. Выполнено параметрическое решение задачи с варьированием начального радиуса и общей массовой концентрации частиц бора. Показано, что присутствие мелкодисперсной фракции бора меняет характер поведения видимой и нормальной скорости распространения пламени. Параметрическое исследование задачи горения аэрозвеси смеси порошков алюминия и бора показало, что

присутствие порошка алюминия существенно сказывается на скорости горения аэрозвеси. При этом весомую роль начинает играть температура зажигания частиц алюминия. Показано, что при малых значениях температуры зажигания присутствие частиц алюминия в аэрозвеси увеличивает общую массовую концентрацию смеси порошков приводит к увеличению скорости горения. Смесь порошков ведет себя аналогично аэрозвеси порошка алюминия. Этот результат качественно совпадает с результатами из научной литературы. При более высоких температурах зажигания поведение скорости горения аэрозвеси смеси порошков алюминия и бора совпадает с поведением аэрозвеси порошка бора. Увеличение массовой концентрации приводит к уменьшению видимой скорости распространения пламени. Выполнены параметрические расчеты задачи искрового зажигания аэрозвеси порошка бора в от массовой концентрации частиц, а также определен механизм успешного зажигания частиц. Определен механизм зажигания газозвеси порошка бора. Определено, что температуры частиц и газа при зажигании ведут себя следующим образом. В начале процесса температура в зоне искрового тепловыделения падает, идет медленный прогрев газа и частиц в отдалении от этой области. В зоне прогрева начинается окисление частиц с выделением тепла, скорость нагрева газа и частиц увеличивается. С разогревом частиц процесс окисления и выделения тепла ускоряется. После достаточного разогрева испаряется окисный слой, начинаются гетерогенные реакции на поверхности частиц и в газовой фазе. Температура частиц увеличивается, и начинает превышать температуру газа, формируется зона горения, которая распространяется от зоны воспламенения. Показано, что относительное изменение минимальной энергии искрового зажигания с увеличением радиуса частиц мало.

6. Разработана физико-математическая модель нестационарного безгазового горения многослойных биметаллических нанопленок с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры с использованием модели плоских реакционных ячеек. Получены зависимости скорости горения от характерной величины гетерогенной структуры образца. Расчетно-теоретические значения скорости распространения волны СВС по многослойной биметаллической нанопленке с хорошей точностью совпадают с экспериментальными данными в широком диапазоне толщины нанослоев. Выполнено параметрическое исследование зависимости скорости распространения фронта безгазового горения от соотношения толщин нанопленок, начальной температуры пленки и теплоотдачи в окружающую среду. Показано, что скорость волны СВС зависит от размера реакционной ячейки (чем меньше размер реакционной ячейки, тем выше скорость волны), полученный результат согласуется с данными экспериментальных исследований, опубликованных в научной литературе. Получено теоретическое значение скорости горения многослойной нанопленки Ni-Al, равное 12.8 м/с, это значение отличается от результатов экспериментальных исследований на 28 %. Разработаны физико-математические модели теплового взаимодействия между нагретыми металлическими наночастицами и биотканью. Проведены расчеты нагрева биоткани в зависимости от времени импульса лазера и соотношением между временем нагрева и временем накачки лазера. Выполнено параметрическое исследование задачи прогрева биологической ткани от двухслойной наночастицы, нагреваемой импульсом лазера.

Исследование выполнено в безразмерных переменных. Из расчетов определена граница значений параметров, для которой происходил переход от режима перегрева биоткани к режиму неполного разогрева рассматриваемой области. Показано, что увеличение времени действия импульса лазера в 10 раз приводит к расширению области параметров, соответствующих перегреву биоткани. Уменьшение параметра, отвечающего за величину воздействия лазерного излучения, приводит к уменьшению области значений параметров, для которой возможен перегрев биоткани. Наибольшая область прогрева реализуется при времени действия импульса равном времени паузы. При увеличении времени паузы область параметров, соответствующая перегреву биоткани, сужается и стремится к одному и тому же значению. Расчеты показали, что на границе между областью перегрева биоткани и областью частичного нагрева возможна реализация колебательного режима нагрева, когда изотерма, определяющая температуру $T = 44$ С перемещается по среде колебательным образом.

7. Результаты работы доложены на 29 научных конференциях. Материалы исследований были опубликованы в 62 работах, среди которых 1 монография и 21 работа в изданиях, индексируемых базой данных Scopus. По материалам работ студентами-исполнителями проекта защищено два бакалаврских диплома, на июнь 2020 запланирована защита 1 бакалаврского и 1 магистерского диплома.