

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2017 г. по 30.06.2018 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 № 17-72-20013

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

За первый год выполнения Проекта были получены следующие результаты:

1. На основе разработанной модели горения наноразмерной частицы алюминия проведены расчеты времени сгорания наночастицы алюминия при различной начальной температуре и давлении окружающего газа, содержащего окислитель. Получена зависимость времени сгорания наночастицы алюминия от температуры и давления окружающего газа. Полученная зависимость хорошо согласуется с экспериментальными данными из [Bazyn T., Krier H., Glumac N. Combustion of nanoaluminum at elevated pressure and temperature behind reflected shock waves //Combustion and Flame. 2006. V.145, № 4. P. 703-713]. Разработанная модель была использована для расчета динамики нарастания окисного слоя при хранении порошка наноалюминия на воздухе при нормальных условиях. Из результатов расчета получена скорость нарастания окисного слоя, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными, опубликованными в научной литературе [Громов А.А и [др.] Физика и химия горения нанопорошков металлов в азотсодержащих газовых средах / А.А. Громов и [др.]. Томск: Изд-во Том. Ун-та, 2007. 334 с].

С использованием разработанной модели окисления наноразмерной частицы алюминия разработана математическая модель горения замороженной водяной суспензии нанодисперсного алюминия (ALICE). Особенность модели в том, 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 над поверхностью ALICE определяется скорость окисления частиц алюминия и связанная с ней скорость тепловыделения. Разработанная модель не требует задания температуры зажигания частиц алюминия. Из численного решения системы уравнений математической модели получена зависимость линейной скорости горения ALICE от давления, удовлетворительно согласующаяся с известными экспериментальными данными [Pourpoint T.L., Wood T.D., Pfeil M.A., Tsohas J., Son S.F. Feasibility Study and Demonstration of an Aluminum and Ice Solid Propellant //International Journal of Aerospace Engineering. Vol. 2012, Article ID 874076, 11 p. doi:10.1155/2012/874076].

С использованием разработанной модели окисления наноразмерной частицы алюминия и модели горения замороженной водяной суспензии нанодисперсного

алюминия разработана математическая модель горения аэрозвеси нанодисперсного порошка алюминия. Определена зависимость скорости распространения фронта горения от массовой концентрации нанодисперсного порошка алюминия в воздухе и от начальной температуры аэрозвеси. Результаты расчетов хорошо согласуются с результатами экспериментальных измерений [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. № 156. С. 5-13].

С использованием эмпирической модели горения частиц алюминия разработана математическая модель горения замороженной водяной суспензии смеси микро- и нано- дисперсного порошка алюминия. Численно определена скорость горения замороженной водяной суспензии порошка алюминия в зависимости от размера частиц алюминия. Результаты расчетов скорости горения замороженной водяной суспензии бидисперсного порошка алюминия хорошо согласуются с результатами экспериментальных измерений [Connell T.L., Risha G.A., Yetter R.A., Yang V., Son S.F. Combustion of bimodal aluminum Particles and ice mixtures //International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion. 2012. Vol.3, № 11. P. 259-273.]

С использованием эмпирической модели горения частиц алюминия реализован численный алгоритм решения задачи горения смесового металлизированного твердого топлива на основе перхлората аммония. Численно определена скорость горения смесового металлизированного твердого топлива в зависимости от размера и массовой концентрации частиц алюминия. Характер зависимости скорости горения от массового содержания фракций порошка алюминия качественно соответствует результатам, представленным в научной литературе [Архипов В.А., Коротких А.Г., Кузнецов В.Т., Савельева Л.А. Влияние дисперсности добавок металлов на скорость горения смесовых композиций //Химическая физика. 2004. Т. 23, № 9. С. 18-21].

2. Разработана физико-математическая модель искрового зажигания аэрозвеси угольной пыли, состоящей из наноразмерных частиц, с учетом лучистого теплопереноса. Получены зависимости минимальной энергии искрового зажигания аэрозвеси наноразмерной угольной пыли от состава смеси. Показано, что лучистый теплоперенос влияет на минимальную энергию искрового зажигания в области малых и средних значений массовой концентрации частиц в аэрозвеси. Показано, что чем больше размер частиц, тем сильнее степень черноты влияет на минимальную энергию искрового зажигания.

Разработана физико-математическая модель очагового зажигания аэрозвеси угольной пыли, состоящей из наноразмерных частиц, с учетом выхода летучих компонентов из частиц. Показано, что увеличение процентного содержания летучих компонентов в частицах приводит к уменьшению видимой скорости распространения фронта горения.

Разработана математическая модель искрового и очагового зажигания аэрозвеси порошка алюминия. Получены критические условия (минимальная энергия искрового разряда) искрового зажигания аэрозвеси порошка алюминия в

зависимости от характеристик газозвеси. Получены зависимости скорости распространения фронта горения в аэрозвеси порошка алюминия в зависимости от размера частиц и массовой концентрации порошка алюминия в воздухе.

Построена модель горения угле-метано-воздушной смеси в рекуперативной горелке типа «Swiss-roll» на основе численного решения уравнений гидродинамики для многокомпонентных многофазных химически реагирующих течений, записанных в двухмерном приближении с учетом сопряженного теплообмена с внутренними стенками горелки. Учитывались пять протекающих в газовой фазе гомогенных реакций и три реакции, протекающие на поверхности угольных частиц. Определены пределы устойчивого режима работы горелки. Показано, что увеличение скорости втекающей смеси с 0.1 м/с до 1 м/с приводит к смещению зоны тепловыделения в центр горелки. Дальнейшее увеличение скорости втекания ведет к выносу зоны тепловыделения из горелки и прекращению ее функционирования. Увеличение содержания частиц угля приводит к смещению зоны реакции во входную часть горелки, и к увеличению тепловыделения в горелке.

Предложена разностная схема для решения уравнений газодинамики двухфазных течений. На примере численного решения задачи о распространении ударной волны в газодисперсной среде показано, что предложенная разностная схема, реализующая правые части, учитывающие функции динамического и теплового взаимодействия газа и частиц, на верхнем временном слое, имеет более широкий диапазон устойчивости по размеру частиц, чем аналогичная разностная схема, реализующая правые части на нижнем временном слое.

Разработана физико-математическая постановка задачи сжигания угле-воздушной смеси в замкнутом объеме. Постановка задачи учитывает выход летучих компонентов при нагреве частиц и дальнейшее их горение; теплоотдачу от газа и излучение от частиц в окружающую среду через боковую поверхность сферического объема; зависимость коэффициента теплопроводности газа от температуры. Расчетно-теоретическим путем определено влияние размера и массовой концентрации частиц на максимальное давление, достигаемое в сферическом объеме.

3. Разработана математическая модель процесса испарения капли керосина, содержащего перемешанный в нем наноразмерный порошок алюминия, в газе с высокой температурой. Численно получены зависимости динамики изменения диаметра капли керосина во времени, которые хорошо согласуются с данными экспериментальных измерений [Irfan Javed, Seung Wook Baek, Khalid Waheed, Ghafar Ali, Sung Oh Cho. Evaporation characteristics of kerosene droplets with dilute concentrations of ligand-protected aluminum nanoparticles at elevated temperatures //Combustion and Flame, 2013, V. 160, n. 12, с. 2955-2963]. Показано, что при учете лучистого теплообмена зависимость времени испарения капли не пропорциональна квадрату ее начального диаметра.

Сформулирована модель распространения фронта горения в аэрозоле керосина, содержащего наноразмерный порошок алюминия. Для численного решения системы уравнений математической модели разработан алгоритм и программа ЭВМ.

Проведено тестирование алгоритма и программы ЭВМ. Верификация расчетов по программе показала выполнимость законов сохранения массы и энергии.

4. Сформулирована 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 [Рогачёв А.С., Мукасьян А.С. Горение гетерогенных наноструктурных систем (обзор) //Физика горения и взрыва. 2010. Т. 46, №3. С. 3-30].

5. Разработаны физико-математические модели теплового взаимодействия между нагретыми металлическими наночастицами и биотканью. Первая физико-математическая модель сформулирована для одиночной двухслойной наночастицы, нагреваемой периодическим импульсом лазера. Проведены расчеты нагрева биоткани в зависимости от времени импульса лазера и соотношением между временем нагрева и временем накачки лазера. Вторая физико-математическая модель сформулирована в предположении нагрева биоткани несколькими наночастицами, равноудаленными друг от друга. Математическая модель состоит из уравнения энергии для частиц, уравнения переноса тепла излучением и уравнений теплопроводности для локальных зон биоткани, находящихся в окрестности наночастиц. Разработан численный алгоритм решения задачи.

6. Сделано 15 докладов на 8 научных конференциях. Опубликовано и принято в печать 13 научных работ (научных статей, тезисов и материалов конференций), 4 из которых входят в базы данных Scopus и WoS.