

На правах рукописи

Лаврук Сергей Андреевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ПЛАВЛЕНИЯ И ДЕТОНАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ
УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ**

01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

Научные руководители:

Федоров Александр Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор;

Хмель Татьяна Алексеевна, доктор физико-математических наук.

Официальные оппоненты:

Ждан Сергей Андреевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией;

Уткин Павел Сергеевич, кандидат физико-математических наук, ФГБУН Институт автоматизации проектирования Российской академии наук, старший научный сотрудник.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук, Отдел механики.

Защита состоится «12» марта 2021г. в 11⁰⁰ на заседании диссертационного совета Д 003.035.02 в Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН по адресу: 630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН по адресу: ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, http://itam.nsc.ru/education/dissertation_board.html

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью учреждения, просьба направлять на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан «___» _____ 202__ г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук



С.А. Гапонов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. На современном этапе развития промышленности перспективным является использование ультрадисперсных частиц в технологических процессах. Они занимают важную нишу при производстве различных технических устройств, например микропроцессоров и другой электроники. Микро- и наночастицы применяются также в медицине и фармацевтической промышленности. В ракетно-космической отрасли интерес к ультрадисперсным частицам высокоэнергетических материалов связан с разработкой новых видов топлив. Включения микро- и наночастиц металлов в состав твердых и гибридных топлив позволяют повысить их энергетическую эффективность, при этом время горения частиц малого размера соизмеримо с временем горения газовых смесей.

При производстве, транспортировке и хранении ультрадисперсных частиц особняком стоит вопрос взрыво- и пожаробезопасности. Особую опасность представляют скопления и взвеси мелкодисперсной органической или металлической пыли в ограниченных объемах (помещениях, вентиляционных шахтах, закрытых транспортерах). Ударная волна или иной источник воспламенения могут привести к возникновению гетерогенной детонации, ее усилению из-за многократных отражений волн от стенок.

Говоря об особенностях использования ультрадисперсных частиц металлов, стоит отметить, что с уменьшением диаметра может происходить изменение их некоторых свойств. Так, для частиц алюминия диаметром менее 5–3,5 мкм происходит изменение режима горения. При расчетах течений в смесях с частицами размером менее 150 нм необходимо учитывать переход от континуального режима обтекания и теплообмена к свободно-молекулярному. Известно, что для частиц менее 30 нм с уменьшением размера происходит изменение их теплофизических свойств.

Из вышесказанного следует, что изучение физических процессов в ультрадисперсных средах может проводиться с применением различных подходов для описания фазовых переходов, горения и детонации. Так, применяя методы молекулярной динамики, можно получить представление о масштабных эффектах, связанных с соизмеримым количеством атомов на поверхности и внутри частицы при исследовании фазовых переходов. Также можно получить данные о теплофизических свойствах отдельных наночастиц, таких как теплоемкость и теплопроводность, отслеживать динамику поведения этих параметров в процессах фазовых переходов. Полученные зависимости можно использовать далее при описании плавления и детонации взвесей частиц в рамках феноменологических и полуэмпирических подходов, например, при решении задач теплопроводности или исследовании плавления частиц нанометрового диапазона на основе решения задачи Стефана. Также эти данные можно принимать во внимание при исследовании детонационных процессов в газозвесах наноразмерных реагирующих частиц (например, алюминия) в рамках двухфазной модели Эйлер – Эйлер с учетом фазовых переходов и привлечением полуэмпирических моделей для описания реакции горения.

Целью диссертационной работы является анализ влияния способа определения теплофизических характеристик частиц металлов нанометровой дисперсности на результаты расчетов процессов плавления и структуры волн детонации, а также выявление различий в процессах распространения детонации взвесей частиц алюминия микронного и нанометрового диапазона размеров частиц в объемах сложной геометрии.

Задачи:

- С помощью методов молекулярной динамики исследовать процессы плавления наночастиц некоторых металлов и их теплофизические свойства.
- Исследовать влияние способа представления коэффициента теплоемкости на результаты расчетов плавления наночастиц некоторых металлов в рамках феноменологических математических моделей.
- Исследовать влияние способа представления коэффициента теплоемкости на результаты расчетов процессов детонационного горения микро- и наночастиц алюминия.
- Методами численного моделирования в механике сплошных сред определить характеристики и критические условия распространения гетерогенной детонации в смесях микронных или наноразмерных частиц алюминия с кислородом в каналах с линейным расширением.

Научная новизна. В работе применён комплексный подход к исследованию задач плавления и детонации частиц в диапазоне размеров от 10 нм до 3.5 мкм, объединяющему методы молекулярной динамики и феноменологические модели. В диссертации рассматривается вопрос применимости зависимостей теплофизических характеристик от температуры и размера частиц, в частности, полученных методом молекулярной динамики, в расчетах процессов плавления и детонации. Также проводится комплексный анализ картин течения и критических условий распространения детонации газовзвесей микро- и наночастиц алюминия в кислороде в каналах сложной геометрии.

Научная и практическая значимость. Теоретическая значимость работы заключается в том, что полученные методами молекулярной динамики результаты могут быть использованы для оценочных расчетов времени и температуры плавления частиц в диапазоне от 5 до 15 нм с помощью феноменологических моделей. Исследование детонационного горения с учетом теплофизических характеристик показало слабое влияние расширенной модели зависимости теплоемкости от температуры на структуру детонационной волны.

Практическая значимость работы заключается в том, что использованные в ней численные методы могут применяться для исследования детонационных течений в ультрадисперсных газовзвесах частиц алюминия, позволяющих улучшить понимание физики процессов и данных о критических условиях распространения гетерогенной детонации в областях сложной геометрии. Полученные результаты могут применяться для проектирования трактов каналов

технических устройств, предполагающих как развитие и распространение детонации, так и ее подавление или предотвращение.

Личный вклад автора. Диссертант самостоятельно разработал алгоритмы для моделирования методами молекулярной динамики плавления частиц металлов, феноменологических подходов, а также доработал алгоритмы для исследования детонационного горения частиц алюминия в областях сложной геометрии. Автор проводил расчеты с использованием разработанных алгоритмов, обработку и анализ результатов, а также участвовал в обсуждении и подготовке статей по результатам исследований.

На защиту выносятся:

- методика анализа процессов плавления и определения коэффициентов теплоемкости наночастиц металлов в рамках моделирования методами молекулярной динамики;
- результаты параметрических исследований плавления наночастиц металлов, показавшие зависимость расчётного времени плавления и распределения температур внутри частиц от способа задания коэффициента теплоемкости;
- результаты параметрических исследований детонации газовзвеси микро- и наночастиц алюминия в кислороде стехиометрического состава при варьировании способа задания коэффициента теплоемкости;
- результаты численного моделирования процессов распространения гетерогенной детонации в стехиометрических взвесьях микро- и наноразмерных частиц алюминия в кислороде в плоских каналах с линейным расширением (картины течения в различных режимах, критерии распространения).

Достоверность результатов основана на использовании признанных физических моделей и корректного математического аппарата, подтверждается верификацией результатов сопоставлением с данными других авторов и валидацией по экспериментальным данным на каждом этапе исследования. Для обоснования точности численных результатов моделирование проводилось на различных расчетных сетках с подтверждением повторяемости.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в журналах «Физика горения и взрыва», «Физика металлов и металловедение», «Челябинский физико-математический журнал». Материалы докладывались на российских и международных конференциях, в том числе: на Международной конференции по методам аэрофизических исследований ISMAR'2016 (Пермь, 2016), ISMAR'2018 (Новосибирск, 2018), на XI и XII Всероссийских конференциях молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (Новосибирск – Шерегеш, 2017 и 2018), XIV Всероссийском семинаре «Динамика многофазных сред» (Новосибирск, 2015), IX Всероссийской

научной конференции «Проблемы разработки, изготовления и эксплуатации ракетно-космической техники и подготовки инженерных кадров для авиакосмической отрасли» (Омск, 2015), 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» (Москва, 2016), 20 Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, ВМСППС'2017 (Алушта, 2017), Международной конференции «XIII Забабахинские научные чтения» (Снежинск, 2017), Всероссийской конференции с международным участием «Современные проблемы механики сплошных сред и физики взрыва» (Новосибирск, 2017), XXV Всероссийской конференции с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды» (Новосибирск, 2017), 9th International Seminar on Flame Structure, (Новосибирск, 2017), 11th International Colloquium on Pulsed and Continuous Detonations (Санкт-Петербург, 2018).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ, 4 из которых в изданиях, рекомендованных ВАК. Список публикаций основных работ представлен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 127 наименований. Общий объем диссертационной работы составляет 118 страниц, включая 39 иллюстраций, 6 таблиц и одно приложение.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, представлен литературный обзор по теме диссертационного исследования, формулируется цель исследований. Показана научная новизна и практическая значимость работы, перечислены положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлены результаты моделирования нагрева и плавления наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) на основе использования методов молекулярной динамики. Целью исследования является получение данных о теплофизических параметрах (температуры плавления в зависимости от радиуса частиц, теплоемкости, теплопроводности) и сравнение с данными, опубликованными в литературе. Полученные результаты далее будут использованы в феноменологических моделях.

В п.1.1 описываются основные подходы, которые применяются для исследования процессов плавления наночастиц металлов методом молекулярной динамики. В разделе приведены основные уравнения и выражения для определения теплофизических величин. Приводится описание постановки задачи, начальные и граничные условия.

В п.1.2 приводится описание результатов моделирования методами молекулярной динамики и их сравнение с данными других авторов. В **п.1.2.1** исследуется задача нагрева и плавления наночастиц золота радиусом 2–10 нм.

На рис. 1 представлены расчетные зависимости полной энергии частиц от температуры $E(T)$ (калорические кривые) для задачи с периодическими граничными условиями. Точка плавления определялась как точка на кривой $E(T)$ в плоскости (E, T) , в которой имеет место резкое изменение энергии. Температура плавления соответствует значению температуры T в этой точке. После скачка, сигнализирующего о фазовом переходе, зависимость энергии от температуры линейна.

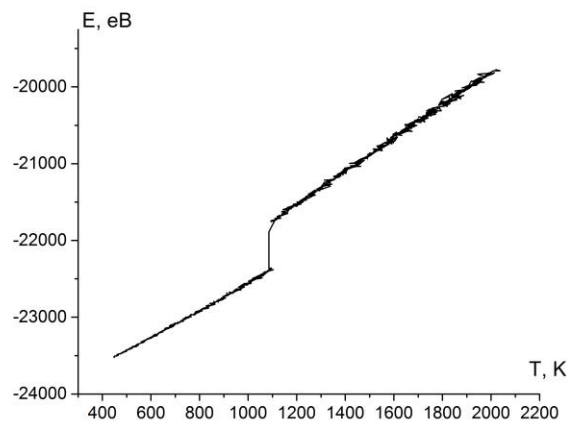


Рис. 1. Калорическая кривая для кубической частицы с размером 3 нм.

Далее представлены расчетные данные для частиц золота в сопоставлении с известными из литературы (валидация модели). Проведены параметрические исследования влияния размера частиц и скорости их нагрева на поведение калорических кривых. Показано хорошее совпадение результатов моделирования с данными экспериментов по плавлению наночастиц золота. Для анализа результатов расчетов была предложена аппроксимирующая зависимость

$$T_m = T_{m0}(1 - \beta/r), \quad (1)$$

где T_{m0} – температура плавления объемного образца, T_m – температура плавления наночастицы радиусом r , β – коэффициент пропорциональности.

Полученные зависимости температуры плавления от радиуса частиц золота хорошо описывают данные экспериментов в пределах разброса (рис. 2). Отметим, что оба типа данных (аппроксимируются одной кривой типа (1) (прямая линия на рис. 2).

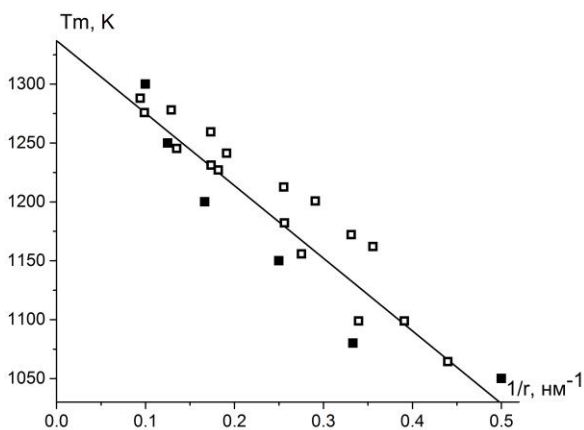


Рис. 2. Зависимость температуры плавления от радиуса частицы для частиц золота.

■ – результаты расчетов, □ – данные экспериментов, линия – аппроксимация вида (1) с $\beta = 0,467$.

В п.1.2.2 описываются результаты расчетов нагрева и плавления наночастиц железа радиусом 1,5–4 нм. Проведено сравнение полученных результатов с данными других авторов, показано качественное и количественное совпадение по временам плавления наночастиц. Полученная зависимость температуры плавления от радиуса частиц описана с помощью формулы (1). Проведено исследование по кристаллизации частиц железа при различной интенсивности охлаждения частицы. Наблюдается гистерезис по температуре, то есть точка

фазового перехода при кристаллизации отличается от точки фазового перехода при плавлении. В п. 1.2.3 описаны результаты моделирования плавления частиц алюминия размером 1–4 нм, а также проведена аппроксимация зависимости температуры плавления от радиуса частицы на основе формулы (1).

Сравнение коэффициентов пропорциональности β для металлов, рассмотренных выше, и некоторых других металлов представлено в п. 1.2.4. Установлено, что для металлов с объёмно-центрированной решеткой (железа, вольфрама, хрома и молибдена) и некоторых металлов с гранецентрированной решеткой (золота, никеля и меди) для оценочных расчетов можно использовать единый коэффициент пропорциональности $\beta = 0,4$ (рис. 3).

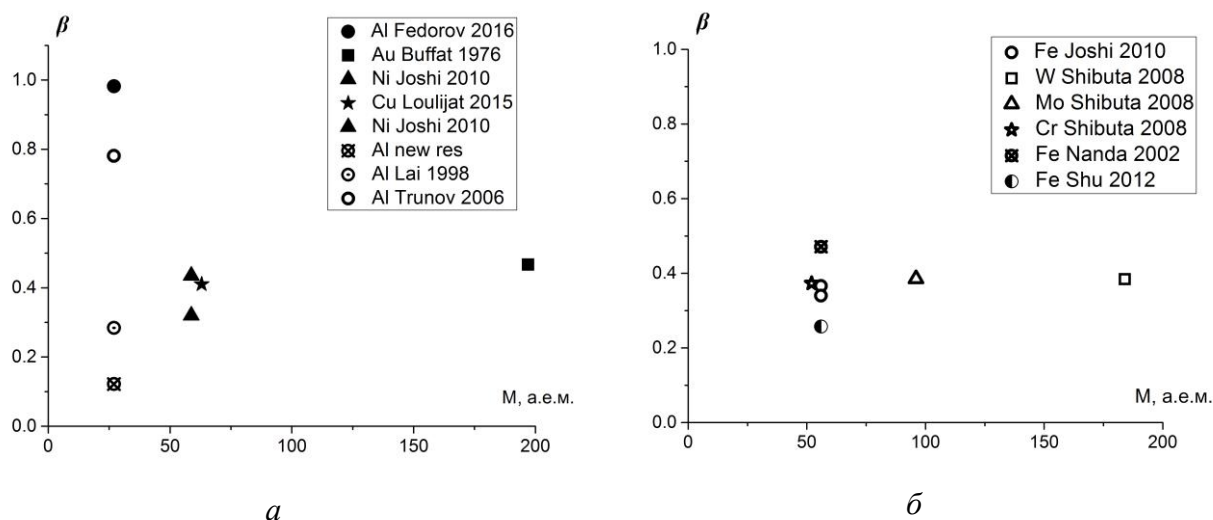


Рис. 3. Зависимость коэффициента β от относительной атомной массы.

a – металлы с гранецентрированной решеткой, b – металлы с объёмно-центрированной решеткой.

В п. 1.3 приводится способ определения и аппроксимационная формула для коэффициентов теплоемкости железа, золота и алюминия. Определение теплоёмкости наночастиц приведено в п. 1.3.1 и заключается в дифференцировании функции по температуре, выражающей зависимость полной энергии частиц от температуры. После чего полученная зависимость аппроксимировалась с использованием формулы

$$C_p = \alpha + \beta \exp(-\gamma(T - T_*)^2). \quad (2)$$

Значения коэффициентов α , β , γ и T_* для различных размеров частиц железа приведены в табл. 1. Сравнение с данными других авторов показало, что результаты качественно совпадают. Некоторые количественные различия обусловлены использованием различным потенциалов взаимодействия.

В п. 1.3.2 приводится описание аппроксимирующих зависимостей теплоемкости от температуры для наночастиц золота, железа и алюминия размером 2–7 нм, а также для объемных образцов этих же металлов. Полученные аппрок-

Таблица 1. Значения коэффициентов в формуле (2) для частиц железа

Радиус, r нм	α , эВ/(атом·К)	β , эВ/(атом·К)	γ , 1/К ²	T_* , К
1,5	2.8×10^{-4}	1.22×10^{-3}	2.83×10^{-4}	1527
2		1.75×10^{-3}	3.96×10^{-4}	1609
3		1.78×10^{-3}	4.21×10^{-4}	1685
4		1.99×10^{-3}	3.94×10^{-4}	1707

симационные формулы будут использованы для расчета процесса плавления частиц с помощью феноменологического подхода.

Во второй главе рассмотрены задачи о нагреве и плавлении частиц металлов, помещенных в высокотемпературное поле, в рамках феноменологического подхода с применением полученных в Главе 1 данных о теплофизических характеристиках наночастиц. Также будут рассмотрены задачи детонационного горения нанодисперсных и микродисперсных взвесей частиц алюминия при различных аппроксимациях коэффициента теплоемкости. Целью исследований является анализ процессов нагрева, плавления и детонационного горения частиц металлов с применением различных подходов и определение влияния способов представления теплофизических характеристик на результаты моделирования.

В п. 2.1 приводится литературный обзор работ, касающихся применения феноменологического подхода к описанию плавления наночастиц, а также работ, указывающих на перспективы применения наноразмерных частиц алюминия в качестве добавок к рабочим смесям в детонационных двигателях.

В п. 2.2 описывается плавление наночастиц с использованием задачи Стефана и анализируется применение различных способов задания теплоемкости при описании плавления с помощью феноменологического подхода. В п. 2.2.1 описывается феноменологическая математическая модель, а также аппроксимирующие модели теплоемкости, которые исследуются в данном разделе. Рассматриваются следующие модели теплоёмкости: зависимость $c_p(T)$ для наноматериалов, полученная из аппроксимации молекулярно-динамических расчетов по формуле (2); зависимость $c_p(T)$ для объемного материала, полученная в п. 1.3.2; описание с помощью постоянного значения теплоемкости при $T = 300$ К.

В п. 2.2.2 описываются термограммы плавления – зависимости температуры от пространственной переменной на различные моменты времени t (отнесенные к характерному времени $t_0 = \rho c_p r_{p0}^2 / \lambda$, где r_{p0} – начальный радиус частицы). На рис. 4,а представлены термограммы для расчета плавления частиц золота (п. 2.2.2.1) для модели задания теплоемкости постоянным значением $c_p(300)$. Сплошной линией показано распределение температур в жидкой фазе, а штриховой – внутри твердого ядра. Также нанесена зависимость температуры

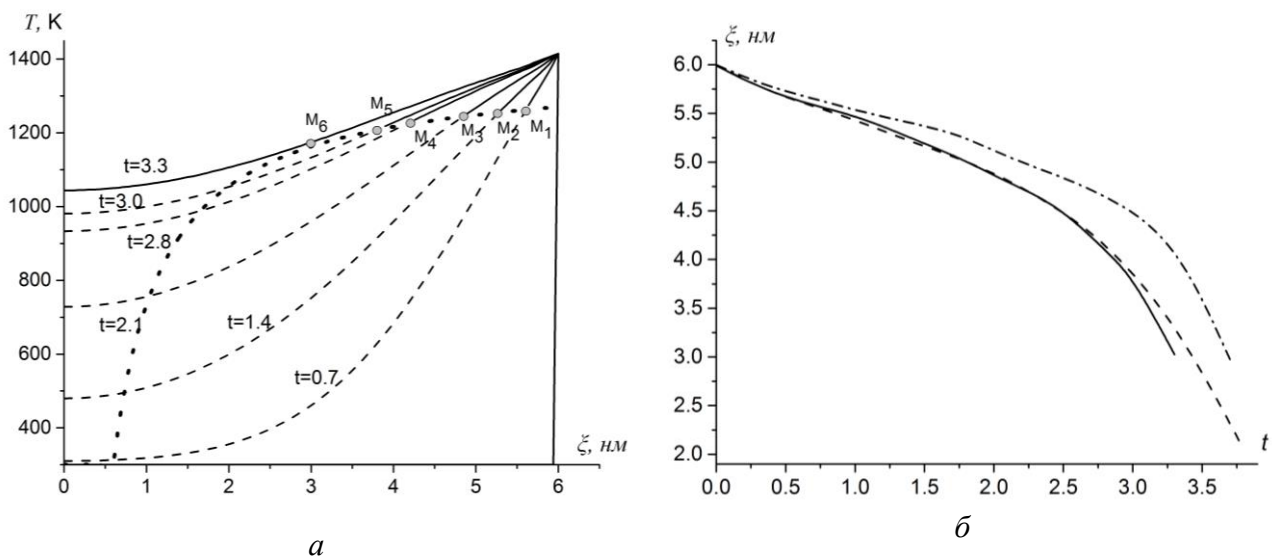


Рис. 4. Термограммы плавления частицы золота.

a – распределение температур в частице в зависимости от времени: сплошные линии – температуры в расплаве, штриховые – температуры внутри твердого ядра, пунктирная линия – зависимость температуры плавления от размера ядра $T = T_m(r)$; b – положение фронта плавления в зависимости от времени для частиц золота: сплошная линия – $c_p = \text{const}$, штрихпунктирная линия – $c_p(T)$ для объемного материала, пунктирные линии – $c_p(T)$ аппроксимация $c_p(T)$ для наночастиц (2).

плавления от размера ядра $T = T_m(r)$ – функция типа (1), определенная для каждого типа частиц в Главе 1. Границей фазового перехода определена точка в пространстве (r, T) , $0 \leq r \leq L$, $300 \leq T \leq 1415$, в которой имеет место пересечение кривой плавления $T = T_m(r)$ и термограммы $T = T(r, t_i)$ в некоторый момент времени t_i . На момент времени $t = 0,7$ в жидкой фазе находится часть частицы (точка пересечения M_1 , рис. 4,а). Постепенно частица прогревается и происходит движение границы фазового перехода вглубь. На рис. 4,а показан ряд термограмм плавления, а также выделены точки пересечения термограмм с кривой плавления $T = T_m(r)$. В соответствии с механизмом плавления наноразмерных объектов, по мере продвижения этой границы внутрь твердого ядра, температура границы плавления понижается. Точка касания с функцией $T_m(r)$ указывает на полное проплавление частицы, которое происходит за время $t = 3,3$.

Полученные точки пересечения (M_i) наносятся на кривую положения фронта плавления в зависимости от времени (рис. 4,б). На рис. 4,б представлены кривые положения фронта плавления с течением времени для различных моделей представления теплоемкости. Видно, что при использовании различных моделей теплоемкости время плавления определяется практически одинаковым и составляет около $t = 3,5$. При этом траектории движения также близки между собой.

Таблица 2. Времена плавления различных металлов при использовании трех моделей теплоемкости

Материал, радиус частиц	$c_p(T)$ для наночастиц	$c_p(T)$ для объемного материала	$c_p = \text{const}$
Железо, 6 нм	8,5	4,9	3,8
Золото, 6 нм	3,8	3,7	3,3
Алюминий, 6 нм	3,5	3,0	2,5

В п. 2.2.2.2 и п. 2.2.2.3 описывается плавление частиц железа и алюминия. Значения времен плавления для наночастиц золота, железа и алюминия приведены в таблице 2. В целом, из полученных результатов следует, что использование различных подходов для описания коэффициента теплоемкости сказывается на определении времени плавления и распределении температур внутри частиц следующим образом: не влияет на частицы золота, слабо влияет на частицы алюминия и в значительной степени влияет на частицы железа, где из-за большого различия значений теплоемкости объемного материала и наночастиц (данные получены методами молекулярной динамики), время плавления различается практически в два раза.

В п. 2.3 рассматривается исследование влияния зависимости теплоемкости частиц от температуры на структуру волны гетерогенной детонации. В качестве модели рассматриваются взвеси частиц алюминия в кислороде стехиометрического состава. В п. 2.3.1 приводятся обоснования данных исследований, связанных с гипотезой о том, что высокоскоростном нагреве частиц происходит термическое расширение ядра алюминиевой частицы, это и приводит к растрескиванию оксидной пленки. Таким образом, для субмикронных и наноразмерных частиц ($d < 5$ мкм) происходит снижение температуры воспламенения до температуры плавления частиц алюминия.

В п. 2.3.2 приводится описание используемой в данном исследовании математической модели, основанной на модели детонации Зельдовича – Неймана – Дюринга. Согласно ей, структура детонации состоит из лидирующего скачка в газовой фазе и примыкающей зоны тепловой, скоростной и химической релаксации, в которой также происходят процессы плавления и испарения алюминия. В п. 2.3.3 описываются модели теплоемкости частиц алюминия, которые используются для описания структуры детонационной волны. Учет наноразмерных эффектов в описании коэффициента теплоемкости здесь не представляется целесообразным, т.к. рассматривается диапазон частиц больше 30 нм. Для описания теплоемкости используются значения $c_p = 880$ Дж/кг·К и 1176 Дж/кг·К и функциональной зависимости $c_p(T)$ для объемного образца, которая была предложена в п. 1.3.2. Представлены результаты расчетов численного моделирования для частиц 50 нм (п. 2.3.4.1), 100 нм (п. 2.3.4.2) и 1 мкм

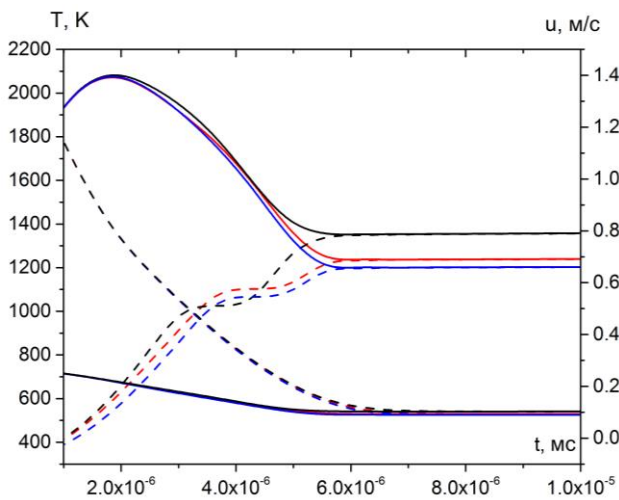


Рис. 5. Параметры достижения скоростного и теплового равновесия системы.

Сплошная линия – газ, пунктирная линия – частицы, $c_p = 880$ Дж/кг·К – черные кривые, $c_p(T)$ для объемного материала – красные кривые, $c_p = 1176$ Дж/кг·К – синие кривые).

Различия проявляются лишь в определении равновесного состояния по температуре при $c_p = 880$ Дж/кг·К (черная кривая), которое достигается при 1400 К. При этом время достижения температурного и скоростного равновесия одинаково и составляет $t = 6 \cdot 10^{-6}$ мс, вне зависимости от используемой модели теплоемкости. Из анализа полученных результатов следует, что использование различных способов представления теплоёмкости в целом оказывает незначительное влияние на результаты расчетов в рамках представленной выше модели детонационного горения частиц алюминия. Различия имеются лишь на узких участках структуры детонационной волны и не превышают 5%.

Исходя из вышеизложенного, использование константы при описании теплоемкости для данной модели позволяет вполне адекватно описывать процесс нагрева, воспламенения и горения частиц в детонационных процессах. Представленные далее результаты получены при $c_p = 880$ Дж/кг·К.

В главе 3 исследуется влияние дисперсности взвеси от микронного и до субмикронного, нанометрового диапазона размеров частиц алюминия на характеристики и условия распространения детонации в каналах с расширением. В п. 3.1 проведен литературный обзор существующих работ по исследованию гетерогенной и газовой детонации в каналах различной геометрии. Также описаны особенности распространения детонации в микронных и субмикронных взвесьях частиц диаметром менее 10 мкм.

В п. 3.2 описывается математическая модель, которая используется в ходе расчетов. Основные уравнения, описывающие законы сохранения массы, импульса и энергии, а также замыкающие соотношения и механизмы взаимодействия для каждой из фаз представлены в п. 3.2.1. В п. 3.2.2 приводятся уравне-

(п. 2.3.4.3). На рис. 5 представлено распределение температуры и скорости за фронтом детонационной волны в газозвеси частиц диаметром 50 нм. Начальный рост температур газа для всех моделей теплоемкости проходит по схожему сценарию, температуры растут примерно до 2100 К, после чего их значения начинают падать до достижения температурного равновесия для частиц и газа. Практически совпадают пиковые значения давления и распределения других параметров за фронтом волны. Температурное равновесие достигается при $c_p(T)$ объемного материала и $c_p = 1176$ Дж/кг·К (красная и синяя кривые) примерно при одной и той же температуре ниже 1200 К. Раз-

ния для описания процессов горения частиц. Отмечены различия в кинетике горения частиц микронного и субмикронного (нанометрового) размера частиц, обусловленные переходом от диффузионного режима, при котором время горения частиц алюминия пропорционально квадрату диаметра частицы ($t_b \sim d^2$), к кинетическому режиму горения, при котором время горения пропорционально диаметру в степени 0,3 ($t_b \sim d^{0,3}$). В п. 3.2.3 описывается постановка задачи: рассматривается плоский канал, соединенный с областью с линейным расширением. Предполагается, что все пространство канала заполнено газозвесью частиц алюминия. В качестве начальных данных рассматривается плоская самоподдерживающаяся детонационная волна, фронт которой находится в узкой части канала в точке L_1 (рис. 6). Точка L_2 отвечает углу расширения α , к которому примыкает наклонная стенка. Длина расчетной области L , ширина узкой части канала H .

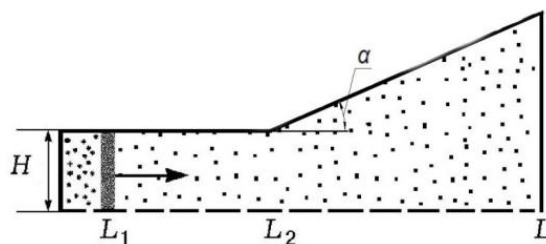


Рис. 6. Расчетная схема геометрии канала.

Наклонная стенка считалась прямой линией. Для удобства реализации граничных условий сетка организована таким образом, что ее узлы находятся на стенке, при этом соотношение между продольным и поперечным размерами расчетной ячейки зависит от угла наклона. Граничные условия на наклонной стенке канала задаются в соответствии с условиями непротекания и теплоизоляции. В расчетах варьировались ширина канала H , угол наклона стенки α и диаметр частиц d . Численная технология основана на использовании TVD-схемы Хартена–Лакса для газа и схемы Джентри–Мартина–Дэйли для частиц.

В п. 3.2.4 приводится сравнение результатов расчетов на сетках с различным размером расчетной ячейки, которое показало обоснованность использования сетки с шагом 0,0002 м в основных расчетах.

В п. 3.3 приведены результаты исследований течения детонации в каналах с линейным расширением для микронных частиц диаметром в диапазоне от 3,5 до 1 мкм. В п. 3.3.1 представлены результаты расчетов, в которых получены и проанализированы основные режимы распространения детонации, приведено описание характерных черт волновых картин в различных режимах распространения и срыва детонации в микродисперсных взвесьях частиц алюминия. В п. 3.3.1.1 описывается закритический режим, при котором не происходит срыва распространения детонации. В закритическом режиме происходит образование поперечных волн, в результате чего происходит переход от плоской детонационной волны к ячеистой детонации. На рис. 7,а представлена картина численного шлирен-изображения, где видно распространение нескольких поперечных волн по лидирующему фронту детонационной волны. В п. 3.3.1.2 рассматривается критический режим распространения детонации. В таком режиме

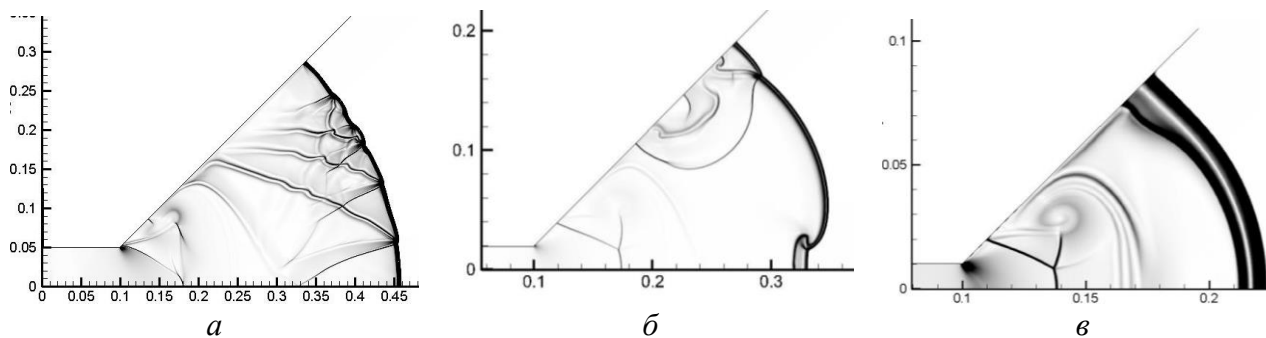


Рис. 7. Шлирен-изображение режимов распространения гетерогенной детонации. *а* – закритический режим $H = 0,05$ м, $d = 2$ мкм, $\alpha = 45^\circ$; *б* – критический режим $d = 2$ мкм, $H = 0,01$ м, $\alpha = 45^\circ$; *в* – докритический режим $d = 3,5$ мкм, $H = 0,01$, $\alpha = 45^\circ$.

происходит частичный срыв детонации с последующим восстановлением. На рис. 7,б представлена картина численного шлирен-изображения для данного режима, где в плоскости симметрии происходит частичное отделение фронта горения от ударного фронта. В дальнейшем происходит реиницирование детонации в поперечной волне. В п. 3.3.1.3 приведено описание докритического режима. В этом режиме происходит срыв детонации и разделение фронта горения и фронта ударной волны, что наблюдается на рис. 7,в. С течением времени расстояние между ударным фронтом и фронтом горения только увеличивается.

В п. 3.3.2 представлены и проанализированы карты режимов распространения детонации в плоскости параметров: угол расширения, критическая ширина канала.

На рис. 8 приведена карта режимов течения для частиц диаметром 3,5 мкм. На участках $\alpha < 30^\circ$ и $60^\circ < \alpha < 90^\circ$ зависимость между критической шириной канала и углом расширения линейна. В диапазоне значений угла расширения (40° – 60°) существует нелинейность во всех рассмотренных случаях. Приведено объяснение такого поведения, связанное с перестроением картины течения для углов расширения $\alpha > 60^\circ$, где не образуется маховская конфигурация на всю ширину канала, как это, в частности, наблюдается при $\alpha = 45^\circ$ (рис. 6,в, $x = 0,14$ м).

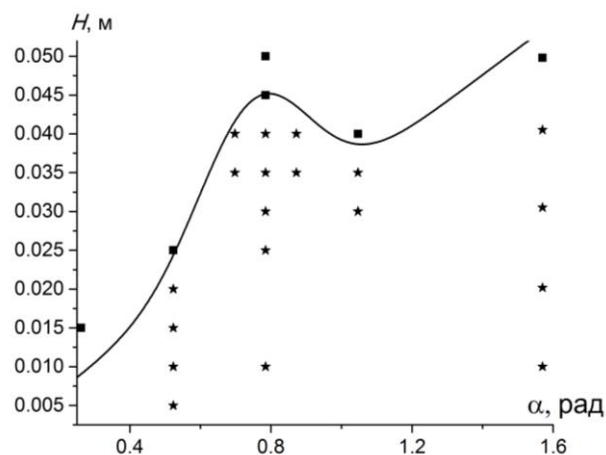


Рис. 8. Карта режимов течения для частиц 3,5 мкм. звездочки – срыв детонации, темные – критический режим, сплошные линии – аналитические критерии.

В п. 3.4 описываются результаты расчетов исследования распространения гетерогенной детонации в каналах с линейным расширением для субмикронных частиц диаметром 200–400 нм. В п. 3.4.1 описываются основные режимы распространения детонации в каналах с линейным расширением. В п. 3.4.1.1

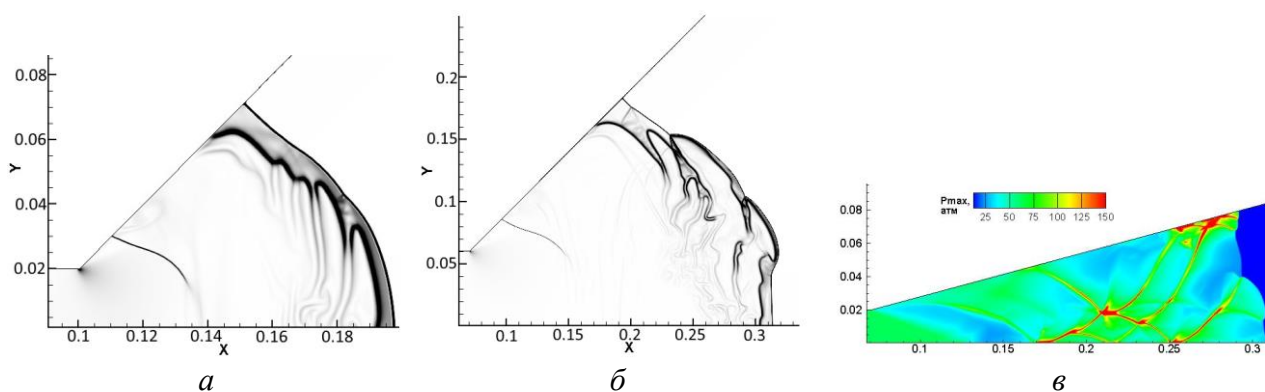


Рис. 9. Режимы распространения гетерогенной детонации.

a – докритический режим, шликрен-изображение $H = 0,02$ м, $\alpha = 45^\circ$, $d = 200$ нм, *б* – критический режим, шликрен-изображение $H = 0,06$ м, $\alpha = 45^\circ$, $d = 200$ нм, *в* – закритический режим, картины максимального давления ($p_{\max}(x, y) = \max[p(x, y, t)]$) $H = 0,02$ м, $\alpha = 15^\circ$, $d = 200$ нм, $t = 0,23$ мс.

приведен анализ картин течения при докритическом режиме течения, особенностью которого для субмикронных частиц является развитие неустойчивости Рихтмайера – Мешкова на фронте горения при срыве детонационного горения (рис. 9,*a*). В п. 3.4.1.2 описывается режим развития детонации в критическом режиме, когда существует достаточно сильная поперечная волна, реиницирующая детонацию на лидирующем фронте (рис. 9,*б*). При дальнейшем распространении по каналу на лидирующем фронте также могут образовываться вторичные поперечные волны и локальные зоны, где происходит срыв и восстановление течения в детонационном режиме. В п. 3.4.1.3 описывается режим, который наиболее близок к закритическому режиму, который наблюдался для микронных частиц, он достигается при достаточно узких углах расширения $\alpha = 15^\circ$ (рис. 9,*в*), когда на картинах максимального давления ($p_{\max}(x, y) = \max[p(x, y, t)]$) наблюдается локальные срывы детонации (синие и голубые зоны) и реиницирование в поперечных волнах.

В п. 3.4.2 представлены карты режимов течения в плоскости параметров: угол расширения – ширина канала для частиц 200 нм (рис. 10) и 400 нм.

В диапазоне $\alpha < 30^\circ$ зависимость между критической шириной канала и углом расширения линейна. В области $35^\circ - 50^\circ$ присутствует нелинейная область, аналогично тому, что описано в п. 3.3.2 для микронных частиц. Однако в области $\alpha > 50^\circ$ критическая ширина канала не за-

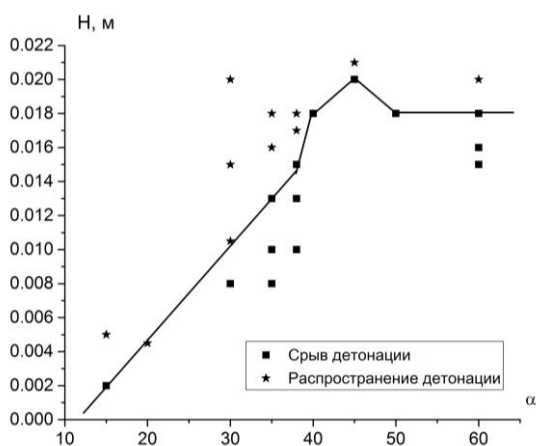


Рис. 10. Карта режимов течения для частиц 200 нм.

Квадраты – срыв детонации, звездочки – критический режим, сплошные линии – аналитические критерии.

висит от угла наклона стенки, что характерно для газовой детонации. Таким образом, субмикронные взвеси частиц алюминия показывают промежуточные свойства между гетерогенной детонацией микронных частиц (присутствует нелинейная область в диапазоне углов расширения 35° – 50°) и газовой детонацией (при угле наклона больше 50° критическая ширина не зависит от угла расширения).

В заключении сформулированы основные выводы диссертации.

1. Разработан алгоритм расчета плавления и кристаллизации наночастиц металлов (золота, железа и алюминия) на основе методов молекулярной динамики. Предложен способ определения коэффициентов теплоемкости наночастиц на основе анализа калорических кривых. Определены аппроксимационные зависимости коэффициентов теплоемкости наночастиц и объемного материала от температуры, пригодные для дальнейшего использования в феноменологических моделях. Для наночастиц железа радиусом от 1,5 до 4 нм данные согласуются с имеющимися в литературе и полученными по альтернативной методике.

2. В феноменологическом моделировании процессов плавления установлено, что использование различных коэффициентов теплоемкости (объемного материала либо зависящего от размера наночастиц) не влияет на расчетные времена плавления и распределение температур внутри наночастиц алюминия и золота. Для наночастиц железа времена плавления различаются практически в 2 раза, распределение температур значительно отклоняется от линейной функции. Дано физическое обоснование этому результату, связанное с существенными различиями теплоемкости наночастиц и объемного материала железа.

3. В феноменологическом моделировании детонационного горения микро- и наночастиц алюминия в рамках полуэмпирической модели приведенной кинетики эффект зависимости теплоемкости от температуры во времена задержки воспламенения и структурах детонации не выявлен, различия наблюдаются на узких участках структуры детонационной волны и не превышают 5%, различия в равновесных значениях температур менее 2%, а максимальные различия давлений отмечаются в химическом пике (до 5 атм). Это позволило для дальнейших расчетов принять модель с постоянным значением теплоемкости.

4. Методами численного моделирования двумерных течений детонации в газозвесах частиц алюминия в рамках кинетики, учитывающей переходной характер режима горения от диффузионного к кинетическому, исследованы процессы распространения детонации в расширяющихся каналах. Определены характеристики волновых картин основных режимов: докритического, критического и закритического. Выявлены их существенные различия в микронных (2–3,5 мкм) и субмикронных (200–400 нм) взвесах, обусловленные как разницей соотношений зон тепловой, скоростной релаксации и горения, так и различиями в кинетических механизмах горения частиц алюминия микрометрового и нанометрового размера.

5. Установлено влияние геометрических параметров: ширины канала, угла расширения, размера частиц на режимы распространения детонации в расширяющихся каналах. Для взвесей микроразмерных частиц (2–3,5 мкм) выявлено, что при малом угле расширения (до 30°) и больших углах расширения (от 60° до 90°) зависимость критической ширины от угла расширения является линейной. Для среднего диапазона углов расширения (от 40° до 50°) критическая ширина канала значительно превышает теоретические оценки. Для взвесей частиц нанометрового диапазона размерности (200–400 нм) установлена промежуточная зависимость между газовой детонацией и гетерогенной детонацией микронных частиц: линейная до угла расширения в 35°, немонотонная в диапазоне от 35° до 50° и не зависящая от угла при $\alpha > 50^\circ$.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах

Рецензируемые научные журналы, входящие в перечень ВАК

1. Федоров А.В., Шульгин А.В., Лаврук С.А. Исследование физических свойств наночастиц железа при плавлении и кристаллизации // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118, № 6. С. 603–609.
2. Фёдоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. I. Режимы распространения // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53, № 5. С. 104–114.
3. Фёдоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. II. Критические условия распространения // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54, № 1. С. 81–91.
4. Лаврук С.А. Моделирование распространения гетерогенной детонации в монодисперсной и бидисперсной смеси алюминия за косым уступом // Челябинский физико-математический журнал. 2018. Vol. 3, № 1. P. 111–123.

Публикации в других изданиях:

1. Fedorov A.V., Shulgin A.V., Lavruk S.A. Study of iron nanoparticle melting // AIP Conf. Proc. 2016. Vol. 1770. Art. 030099 (5 p.). DOI:10.1063/1.4964041.
2. Khmel T.A., Fedorov A.V., Lavruk S.A. Two-dimensional detonation flows in gas suspensions of micro- and nanosized aluminum particles // AIP Conf. Proc. 2017. Vol. 1893. Art. 030143 (8 p.). DOI:10.1063/1.5007601.
3. Khmel T.A., Fedorov A.V., Lavruk S.A. Diffraction of detonation wave in bidisperse mixture in expanding channel // AIP Conf. Proc. 2017. Vol. 1893. Art. 030139 (6 p.). DOI: 10.1063/1.5007597.
4. Fedorov A.V., Lavruk S.A. An influence of expressions for thermophysical parameters on calculation results of melting and detonation combustion of aluminum suspensions // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. Vol. 1128. Art. 012069. (6 p.). DOI:10.1088/1742-6596/1128/1/012069.

5. Khmel T.A., Fedorov A.V., Lavruk S.A. Modeling of heterogeneous detonation propagation in variable cross-section channels with consideration of transient combustion of aluminum // AIP Conf. Proc. 2018. Vol. 1939. Art. 020024 (9 p.). DOI:10.1063/1.5027336.
6. Khmel T.A., Lavruk S.A. Modeling the detonation propagation in nanodisperse mixture of aluminum particles in channels with expansion // J. Phys. Conf. Ser. 2018. Vol. 1128. Art. 012079 (6 p.). DOI:10.1088/1742-6596/1128/1/012079.

Ответственный за выпуск С. А. Лаврук

Подписано в печать 18.12.2020
Формат бумаги 60×84/16, Усл. п. л. 1.1,
Уч.-изд. л. 1.0, Тираж 100 экз., Заказ № 6

Отпечатано в типографии ООО «Параллель»
630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1