ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение ................................................................................................................... 5

Библиографический список к введению .............................................................. 13

ГЛАВА 1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ СПЛОШНЫХ

И ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД ................................................................. 15

§ 1.1. Основные уравнения механики гомогенной химически активной

среды .......................................................................................................... 17

1.1.1. Законы сохранения ......................................................................... 17

1.1.2. Основные уравнения для описания течения вязкой тепло-

проводной смеси реагирующих газов с учетом перемеши-

вания ................................................................................................ 24

§ 1.2. Математические модели для описания движения смеси газа и

мелких твердых частиц ............................................................................ 29

1.2.1. Основные уравнения для описания гетерогенной смеси

газа и твердых частиц с учетом их собственного давления ....... 29

1.2.2. Основные уравнения для описания течения смеси газа и

реагирующих частиц, различные приближения данной

модели ............................................................................................. 38

§ 1.3. Химические превращения в газовзвесях в режиме взаимодей-

ствующих континуумов ........................................................................... 42

1.3.1. Основные уравнения взаимодействующих континуумов с

учетом конкретного вида неравновесной химической ре-

акции................................................................................................ 43

1.3.2. Воспламенение газовзвеси в континуальном режиме ................. 47

§ 1.4. Численное исследование течений композитных реагирующих

смесей ......................................................................................................... 58

1.4.1. Уравнения механики гетерогенных сред для описания

движения к-смеси ........................................................................... 58

1.4.2. Детонация в смеси реагирующих газов и реагирующих

частиц .............................................................................................. 61

1.4.3. Тепловой взрыв в смеси капель и твердых частиц ...................... 68

Библиографический список к главе 1 ................................................................ 71

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ

ОДНОМЕРНЫХ И ПЛОСКИХ ЗАДАЧ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

ОДИНОЧНЫХ ЧАСТИЦ И ИХ СОВОКУПНОСТЕЙ ..................... 75

§ 2.1. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в

газовзвеси металлических частиц. Одномерное приближение ............. 75

2.1.1. Модель реагирующей частицы металла ....................................... 76

2.1.2. Количественное описание процесса окисления магниевой

частицы ........................................................................................... 77

2.1.3. Распространение пламени в облаке частиц магния ..................... 81

Выводы ................................................................................................................. 98

§ 2.2. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в

газовзвеси металлических частиц. Учет предпламенного окис-

ления .......................................................................................................... 99

2.2.1. Основные уравнения ...................................................................... 99

2.2.2. Обсуждение результатов ............................................................. 100

Выводы ............................................................................................................... 104

§ 2.3. Сопряженная распределенная математическая модель воспла-

менения образцов магния ....................................................................... 105

2.3.1. Физико-математическая постановка задачи .............................. 105

2.3.2. Стационарное приближение ........................................................ 107

2.3.3. Нестационарная задача ................................................................ 110

2.3.4. Тестирование ................................................................................ 112

2.3.5. Обсуждение численных результатов .......................................... 113

Выводы ............................................................................................................... 117

§ 2.4. Численное моделирование частицы магния в неоднородном

тепловом поле ......................................................................................... 118

2.4.1. Постановка задачи и алгоритм численного решения ................ 118

2.4.2. Обсуждение численных результатов .......................................... 121

§ 2.5. Математическая модель воспламенения магния в расширенном

диапазоне параметров ............................................................................. 123

2.5.2. Стационарная задача .................................................................... 125

2.5.3. Нестационарная задача ................................................................ 127

2.5.4. Обсуждение результатов расчетов .............................................. 128

Выводы ............................................................................................................... 134

Библиографический список к главе 2 .............................................................. 135

ГЛАВА 3. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ ПЛОСКИХ

ЗАДАЧ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦ

МЕТАЛЛА .......................................................................................... 137

§ 3.1. Воспламенение и горение частиц магния в неоднородном теп-

ловом поле ............................................................................................... 137

3.1.1. Физико-математическая постановка задачи .............................. 138

3.1.2. Обсуждение численных результатов .......................................... 140

Выводы ............................................................................................................... 154

§ 3.2. Моделирование горения частицы магния (задача Стефана) ............... 154

3.2.1. Физико-математическая постановка задачи .............................. 155

3.2.2. Обсуждение численных результатов .......................................... 159

Выводы ............................................................................................................... 163

§ 3.3. Физико-математическая модель воспламенения частиц алюми-

ния с учетом плавления .......................................................................... 163

3.3.1. Постановка задачи ........................................................................ 165

3.3.2. Верификация модели ................................................................... 169

3.3.3. Стадия воспламенения в детонации газовзвесей частиц

алюминия в кислороде ................................................................. 172

3.3.4. Универсальный температурный критерий воспламенения

взвесей алюминия ........................................................................ 175

3.3.5. Фактор воспламенения в случае ячеистой детонации .............. 177

Выводы ............................................................................................................... 180

Библиографический список к главе 3 .............................................................. 181

ГЛАВА 4. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-

ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОЧАСТИЦАХ ............ 185

§ 4.1. Математическое моделирование плавления наноразмерных ча-

стиц алюминия и золота (задача Стефана) ........................................... 185

4.1.1. Аппроксимация зависимости температуры плавления от

радиуса .......................................................................................... 187

4.1.2. Физико-математическая постановка задачи .............................. 190

4.1.3. Обсуждение численных результатов .......................................... 191

Выводы ............................................................................................................... 196

§ 4.2. Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия ..... 196

4.2.1. Некоторые понятия молекулярно-динамического подхода ..... 197

4.2.2. Организация расчетов .................................................................. 202

4.2.3. Обсуждение результатов ............................................................. 204

Выводы ............................................................................................................... 208

§ 4.3. Молекулярно-динамическое моделирование плавления наноча-

стиц алюминия методом внедренного атома ........................................ 208

Выводы ............................................................................................................... 214

§ 4.4. Молекулярно динамическое и феноменологическое моделиро-

вание нагрева наночастицы алюминия ................................................. 215

Выводы ............................................................................................................... 223

§ 4.5. Математическое моделирование плавления наноразмерных ча-

стиц металла ............................................................................................ 223

4.5.1. Физико-математическая постановка задачи о плавлении

сферического и цилиндрического образцов алюминия ............ 224

4.5.2. Обсуждение численных результатов .......................................... 225

Выводы ............................................................................................................... 232

§ 4.6. Точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной

ударной волне .......................................................................................... 233

4.6.1. Физико-математическая модель горения алюминиевых

наночастиц в смеси О2, N2 в диапазоне давлений

p0  [8, 32] атм .............................................................................. 235

4.6.2. Обсуждение численных результатов .......................................... 238

Выводы ............................................................................................................... 240

Библиографический список к главе 4 .............................................................. 241

Заключение ........................................................................................................... 247

Приложение .......................................................................................................... 251