

<https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-3-231-243>

УДК 004.4+621.1+621.373.8

Моделирование процессов возникновения и роста фрактальных структур и дефектов камер теплоэнергетических установок

Часть 1

Канд. техн. наук Т. В. Рыжова¹⁾, Д. Н. Бухаров²⁾, докт. физ.-мат. наук, проф. С. М. Аракелян²⁾

¹⁾Белорусский национальный технический университет (Минск, Республика Беларусь),

²⁾Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (Владимир, Российская Федерация)

© Белорусский национальный технический университет, 2023
Belarusian National Technical University, 2023

Реферат. Рассматривается моделирование возникновения и роста возможных фрактальных структур и дефектов на внутренней поверхности камер тепловых энергетических установок, допускающих контролирование и регулирование развития таких стохастических динамических процессов. Речь идет об использовании процедур моделирования для приводимого анализа, имеющих достаточно универсальный характер в рамках определенных подходов. Приведено общее качественное рассмотрение моделирования процессов как осаждения материалов на твердую поверхность различных сложных конфигураций, так и возникновения ее трещиноватости и дефектов фрактальных типов. В первой части проводится аналогия процессов возникновения и роста фрактальных структур и дефектов камер с лазерными процессами управляемого осаждения веществ на поверхность твердого тела и роста ее трещиноватости. Развита модель возникновения и роста фрактальных неоднородностей разного типа и конфигураций на твердой поверхности с выявлением возможности их предварительного мониторинга на начальном этапе появления. При этом проанализированы как различные поверхности в виде покрытий, так и образование трещиноватости и кластерных зон неоднородностей и дефектов. Акцент в ходе исследований сделан на анализе регулируемой их структуры, а также на динамике роста трещиноватости и кластерных зон неоднородностей и дефектов в определенном направлении. На начальном этапе осуществлялся мониторинг указанного процесса образования в пространстве трещиноватости и кластерных зон неоднородностей и дефектов с различным масштабированием: нано- и микромасштабами. Данное исследование проведено в рамках аналогии в условиях: во-первых, заданного управления характеристиками подобных объектов в соответствующем лазерном эксперименте; во-вторых, наличия реальной возможности обеспечения их образования на внутренних поверхностях камер при контакте с рабочим веществом; в-третьих, возможности влияния таких структур на эффективность работы тепловых энергетических установок разного типа в контексте достижения нужной направленности и/или нежелательности изменения показателей и характеристик установок с учетом закономерностей технической термодинамики.

Ключевые слова: дефекты и неоднородности поверхности, моделирование, камеры теплоэнергетических установок, фрактальная структура, аналогия с лазерными процессами, заданное осаждение структур, предварительная диагностика, управляемое воздействие, влияние на режим работы

Для цитирования: Рыжова, Т. В. Моделирование процессов возникновения и роста фрактальных структур и дефектов камер теплоэнергетических установок. Часть 1 / Т. В. Рыжова, Д. Н. Бухаров, С. М. Аракелян // *Наука и техника*. 2023. Т. 22, № 3. С. 231–242. <https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-3-231-243>

Адрес для переписки

Рыжова Татьяна Викторовна
Белорусский национальный технический университет
Партизанский проспект, 77,
220107, г. Минск, Республика Беларусь
Тел.: +375 17 250-36-95
tatsiana.rizhova@yandex.by

Address for correspondence

Ryzhova Tatiana V.
Belarusian National Technical University
77, Partizansky Ave.,
220107, Minsk, Republic of Belarus
Tel.: +375 17 250-36-95
tatsiana.rizhova@yandex.by

Modeling Processes of Emergence and Growth of Fractal Structures and Chamber Defects of Thermal Power Units

Part 1

T. V. Ryzhova¹⁾, D. N. Bukharov²⁾, S. M. Arakelyan²⁾

¹⁾Belarusian National Technical University (Minsk, Republic of Belarus),

²⁾Vladimir State University A. G. and N. G. Stoletovs (Vladimir, Russian Federation)

Abstract. The paper considers modeling the emergence and growth of possible fractal structures and defects on the inner surface of the chambers of thermal power units, which allow control and regulation of the development of such stochastic dynamic processes. We are talking about the use of modeling procedures for the given analysis, which are quite universal in the framework of certain approaches. A general qualitative consideration of the modeling of processes such as the deposition of materials on a solid surface of various complex configurations, and the occurrence of its fracturing and defects of fractal types, is given. In the first part, we consider an analogy between the processes of the emergence and growth of fractal structures and chamber defects with laser processes of controlled deposition of substances on the surface of a solid body and the growth of its fracturing. A number of models have been developed for the emergence and growth of fractal inhomogeneities of various types and configurations on a solid surface with identification of the possibility of their preliminary monitoring at the initial stage of their appearance. At the same time, both various surfaces in the form of coatings and the formation of fracturing and cluster zones of inhomogeneities and defects have been analyzed. The emphasis in the course of research has been made both on the analysis of their regulated structure, and also on the dynamics of the growth of fracturing and cluster zones of heterogeneities and defects in a certain direction. At the initial stage, the indicated process of formation of fractures and cluster zones of inhomogeneities and defects in space was monitored with different scaling: nano- and microscales. This study has been carried out within the framework of an analogy under the following conditions: firstly, given control over the characteristics of similar objects in the corresponding laser experiment; secondly, the presence of a real possibility of ensuring their formation on the inner surfaces of the chambers in contact with the working substance; thirdly, the possibility of such structures influencing on the efficiency of various types of thermal power units in the context of achieving the desired direction and/or undesirability of changing the indicators and characteristics of units taking into account the laws of technical thermodynamics.

Keywords: defects and inhomogeneities of surfaces, modeling, chambers for thermal power units, fractal structure, analogy with laser processes, controlled target deposition of structures, preliminary diagnostics, controllable impact, influence on working regime

For citation: Ryzhova T. V., Bukharov D. N., Arakelyan S. M. (2023) Modeling Processes of Emergence and Growth of Fractal Structures and Chamber Defects of Thermal Power Units. Part 1. *Science and Technique*. 22 (3), 231–242. <https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-3-231-243> (in Russian)

Введение

Актуальность мониторинга и возможности получения предварительной оценки состояния внутренних поверхностей энергоустановок (в аспекте эффективности их работы и прогнозирования безопасности работы в различных условиях и режимах) очевидна и требует использования методов предсказательного моделирования [1–3]. Важно проследить сходную динамику и аналогию формирования подобных структур, с одной стороны, в демонстрационных исследованиях и управляемом моделировании при лазерном поверхностном осаждении веществ разного состава и при воздействии лазерного излучения на подложку и материалы [4, 5], включая также общие закономерности процессов в газожидкостных капельно-коллоидных системах с соответствующими физико-химическими процессами (ср. с [6–11]). Но,

с другой стороны, эти процессы развиваются и в реальных высокотемпературных тепло-технологических жидкостно-газовых тепловых энергетических машинах разного типа [1, 3].

В первом случае удастся провести численное и имитационное моделирование регулируемым образом возникающих динамических структур и неустойчивостей, а также разработать методы управления их конфигурацией и характеристиками в тестовых экспериментах по выявлению особенностей их жизненного цикла в условиях заданного регулирования развития динамических процессов [4, 5, 11, 12].

Во втором случае такие явления взаимодействия рабочего вещества в конкретных энергетических установках с внутренней поверхностью их камер могут приводить к появлению определенных фиксированных стационарных зон локализации дефектов и трещиноватости разной конфигурации в них при состоянии ра-

бочего вещества в разных физических условиях, которое выпадает из непрерывного цикла динамических процессов теплонагрева при эксплуатации тепловых установок [6, 7]. Это, с одной стороны, может приводить к понижению эффективности и КПД тепловых машин. С другой стороны, такие исходные локализованные зоны (даже незначительные), являясь по сути дефектами, стимулируют дальнейшее развитие неоднородностей и трещин на внутренних поверхностях тепловых камер, которые со временем могут трансформироваться в механические повреждения и разрушения [1, 3, 12]. Для тепловых установок это может приводить к катастрофическим последствиям.

Поэтому предварительная диагностика и моделирование таких очагов неоднородностей в процессах их возникновения и разрушающего контроля – неотъемлемая часть эксплуатации тепловых установок. Рассмотрение удобно производить по аналогии с лазерными экспериментами с разными объектами и материалами, в которых можно детально исследовать подобные явления с неустойчивостями и неоднородностями и управлять ими в заданном направлении уже на начальной стадии их возникновения в пространственных микро- и наномасштабах [4, 5, 10–12].

Большое внимание должно уделяться повышению уровня метрологического обеспечения при оценке работы подобных тепловых энергетических машин, причем уже на раннем этапе возникновения таких локализованных неоднородностей микро- и наномасштаба. Нанометрология – новое направление в метрологии, которое обеспечено единством измерений и стандартов с созданием эталонов соответствующих физических объектов и величин, эталонных устройств (ср. с [8, 9]). При этом разработка соответствующих методов поверки и калибровки средств измерений, применяемых в нанотехнологиях, аттестация методик выполнения измерений физико-химических параметров и свойств поверхностных структур как объектов нанотехнологий – достижения сегодняшнего дня [5] в соответствии с ФЗ РФ от 26.06.2008 № 102-ФЗ «Об обеспечении единства измерений». Принципы такого метрологического обеспечения должны иметь опережающий характер и использоваться в любых без исключения технологических процессах еще на этапах их разработки и оптимиза-

ции режимов эксплуатации и конструирования соответствующих установок, тем более в высокоэнергетических тепловых установках разного предназначения.

Необходимость опережающего развития измерительной информации на рынке современных технологий постоянно подчеркивается в ежегодных докладах Национального института стандартов и технологий США (NIST). В них именно инновации в измерениях и метрологии будут являться фактором успешного технологического прорыва почти во всех сферах экономики, особенно в высокотехнологичных секторах промышленности и энергетики.

В настоящее время необходимое контрольно-измерительное оборудование имеется в профильных научно-образовательных и производственно-технологических организациях, например речь идет об электронных, туннельных, атомно-силовых микроскопах и др. Поэтому при создании соответствующей нормативно-правовой и нормативно-технической базы для данной деятельности произойдет гармонизация необходимых нормативных документов, удовлетворяющих международным требованиям.

Кроме того, это предполагает в том числе и проведение работ (на необходимом предварительном этапе) с помощью создаваемых специализированных многомодульных прототипов опытных образцов автоматизированных лазерных технологических комплексов [4]. Они должны обеспечивать соответствующее качество лазерного излучения с согласованными параметрами и достижением необходимой стабильности при выбранных рабочих режимах еще до их промышленной реализации. Это важно в аспекте будущей коммерциализации данных экспериментальных исследований по разработке оригинальных высоких технологий двойного назначения для задач поверхностного термоупрочнения металлических изделий, а также для моделирования предупреждения возможных условий повреждения и разрушения высокоэнергетических тепловых установок с внутренними камерами с рабочим веществом.

Данным исследованиям и должна быть посвящена принципиальная активность в этой области в условиях соответствия мировым конкурентным процессам в такой стратегической отрасли, какой является теплоэнергетика, в частности с газожидкостными рабочими веществами в разных условиях эксплуатации, в том чис-

ле и в экстремальных условиях по разным параметрам (ср. с [1, 3, 13]).

При лазерном воздействии на поверхность некоторого твердого тела, когда речь идет о непрозрачном материале, обычно рассматриваются процессы теплопередачи, например при лазерном поверхностном термоупрочнении (закалке) металлов. При этом базовые принципы такого по сути технологического процесса определяются закономерностями технической термодинамики с учетом свойства теплоты как формы обмена энергией и ее преобразования [1–4].

Но, исходя из простого соотношения Р. Клаузиуса ($dQ = mc_x dT$), связи количества теплоты dQ , полученной телом, с изменением его температуры dT для равновесного процесса нагревания однородного тела с массой m и теплоемкостью в рассматриваемом процессе c_x , известного еще из школьного курса физики, видно, что даже при большом значении dQ , но и большой величине m для определенного материала можем иметь малую величину dT , т. е. тело нагревается в среднем незначительно (что также определяется его теплопроводностью, теплоемкостью и другими процессами, в частности тепловым расширением и деформациями). В то же время, при малых значениях m в зернистых структурах наномасштаба локальная температура в последних может быть очень высокой и должна учитываться при соответствующих пиковых значениях временных параметров (ср., например, с [4, 5, 11]). Однако, как уже отмечалось, изменение температуры тела происходит не только в результате теплообмена, но и зависит от ряда сопутствующих процессов, среди которых необходимо отметить следующие [1–4, 11].

Во-первых, речь идет о том, что под воздействием одновременно протекающей разного типа деформации тела в условиях упругой или неупругой/пластической деформации, а также теплового расширения (т. е. в результате чего совершается работа) часть энергии уходит на это и в итоге температура тела возрастает на еще меньшую величину.

Во-вторых, данная деформация происходит по-разному в различных локальных областях тела (зависит от его формы и химического элементного состава в каждой такой области – термохимия с разными адсорбентами).

В-третьих, явление передачи энергии в форме теплоты в твердом теле зависит от теплопроводности в таком неравномерно нагретом теле с соответствующим коэффициентом температуропроводности, определяемым различными механизмами теплопроводности (электронной, решеточной и т. д.).

В-четвертых, происходящий поверхностный нагрев тела (именно он характерен для лазерного воздействия на тело) имеет свою специфику и зависит от граничных условий на его поверхности, его структуры, слоистости и глубины прогрева, что определяет различные фазовые состояния среды (с оплавлением или без него, с диффузией различных состояний и химических элементов, а в целом – открытостью системы (динамические процессы по механике) и др.).

В-пятых, принципиальными являются время нагрева тела (время лазерного облучения тела) и реализуемый режим охлаждения (естественный в соответствующей окружающей среде или внешнее охлаждение) с химическими превращениями и течением газов/паров (с экранированием лазерного излучения в месте облучения).

В-шестых, при наличии на поверхности неоднородностей и дефектов/шероховатостей пиковое значение температуры и давления на них может быть очень высоким.

Поэтому современные лазерные технологии обработки материалов и решение существующих проблем могут быть весьма полезными при рассмотрении механизмов возникновения различных неоднородностей и дефектов на поверхности твердого тела, но требуют проведения целенаправленных фундаментальных исследований для последующих прикладных разработок [4, 11]. В частности, это относится к обработке и повышению износостойкости внутренних поверхностей и/или их фрагментов для камер, находящихся в контакте с рабочим веществом в определенных динамических тепловых условиях для газа и жидкости (весьма экстремальных), в тепловой установке при ее дальнейшей реальной эксплуатации. В таком конкретном аспекте подобные предварительные диагностика и управляемое воздействие на поверхность объекта с выявлением условий возникновения на ней неоднородностей и дефектов по разным причинам могут иметь немаловажное значение при выборе и контроле режимов работы тепловой машины.

Действительно, при лазерном воздействии, допускающем управляемые и моделируемые процессы развития, на различные образцы и детали из разных материалов с разным химическим составом, с разной структурой, разной формы, разной массы и с разными требованиями к реализуемому изменению/модификации их функциональных и конструкционных характеристик/свойств (объемных поверхностных, граничных, в тонких пленках и в местах соприкосновения разных частей и фрагментов – ср. с [4, 5, 11]) должны использоваться специализированные типы лазерных комплексов и реализовываться с их помощью выбираемые режимы обработки изделий, а также оценки их стойкости и надежности в агрессивной среде для каждой определенной номенклатуры изделий, включая внутренние (поверхностные) области камер тепловых установок.

Это основывается на нижеследующих базовых позициях [4, 11]. Первое, разные параметры используемого лазерного излучения для каждой конкретной операции: размеры и форма лазерного пучка, длительность лазерных импульсов по времени, пиковая и средняя мощности излучения, время облучения, фокусировка в одно- и/или многопучковом режимах лазерного воздействия на деталь определенной конфигурации на определенную ее поверхность/фрагмент. Второе, применение в процессе проведения технологических работ вспомогательных удерживающих механизмов и устройств для крепления, перемещения или протяжки (например, цилиндрических объектов типа проводов) обрабатываемого изделия/образца с определенным (подготовленным заранее) состоянием его поверхности и управляемой ее поглотительной способностью (гибридные технологии с термо- и механообработкой, химической техноподготовкой и наносимыми покрытиями). Третье, при этом по физике само воздействие лазерного излучения на вещество определяется фундаментальными процессами и неустойчивостями с нестационарными гидродинамическими и волновыми стохастическими явлениями теплопередачи и диффузии (в объеме и на поверхности) при разных условиях сканирования лазерного пучка и времени выдержки в нагретом состоянии поверхности тела под лазерным пучком, что также зависит от скорости нагрева и закона охлаждения. В результате

достигается цель для получения необходимого каналирования излучения с заданными параметрами в обрабатываемой пространственно-распределенной среде с локализованными и дelokализованными неоднородностями и локальным беспорядком лазерно-индуцированных микро- и наномасштаба кластеров с определенными топологией (их плотности, дисперсности и морфологии), деформациями и примесями разного состава (легирование), размерами и характером взаимодействия.

Все это и составляет предмет необходимых поисковых исследований с серией тестовых экспериментов и с проведением физико-математического моделирования. При этом используются дифференциальные нелинейные (с переменными коэффициентами) уравнения [12] с:

временными и пространственными координатами,
обратной связью;

а также технологии имитационного компьютерного моделирования с языками программирования высокого уровня, имеющие широкую область применимости для разных задач.

Данный базовый подход позволяет спрогнозировать ожидаемое состояние образца после его лазерной обработки и произвести оптимизацию ряда параметров – теплофизических для материалов и для реализующихся лазерных технологических процессов [4, 11]. Это дает возможность, в частности, целенаправленно моделировать разные процессы, возникающие на поверхности объектов при определенных условиях, а также определять процедуры для требуемых конечных результатов обработки изделий для разработки соответствующих новых технологий. Важно подчеркнуть, что это касается и лазерного термоупрочнения (закалки) с определенной глубиной для металлов и их комбинаций. Кроме того, удастся улучшать теплопроводность/электропроводимость с индуцированием фазовых превращений – температурных и структурных (поверхностных и/или объемных) в различных композитных материалах [10, 12]. Это имеет принципиальное значение для задач разного направления с учетом закономерностей технической термодинамики при лазерной обработке поверхности, включая внутренние поверхности рабочих камер тепловых энергетических установок [1–3].

Объективная эффективность и достоверность полученных достижений в разработанных технологиях с помощью лазерных технологических комплексов может быть доказана и в реальном масштабе времени, т. е. с управлением режимами в реализуемых процессах, а также на основе проведенных последующих измерений для полученных результатов на высокоточных современных приборах метрологического обеспечения [4, 5]. Именно они позволяют проводить анализ состояний поверхности образцов после проведенной лазерной обработки при разных выбираемых и тестируемых режимах с оптической, нанотехнологической, электрофизической и механико-технологической диагностикой в численных параметрах по соответствующим маршрутным картам и детальным процедурам измерения и детектирования требуемых управляющих параметров для изучения и моделирования возникающих неоднородностей и дефектов в реальных установках при их эксплуатации (ср. с [10]).

Хотя в предмет технической термодинамики входит анализ циклических процессов в тепловых/теплоэнергетических машинах разного типа [3] – от классических газопаровых и жидкостных до энергообразующих (в частности, магнитогидродинамических, термоэлектронных), – однако оценка их работоспособности невозможна без рассмотрения комплексных явлений физико-химических, газо- и гидродинамических процессов, требующих разработки соответствующих математических моделей пневмогидравлических систем на основе матрично-топологических методов (ср. с [13]).

В общем случае это является довольно сложной задачей нелинейной динамики с рассмотрением стохастических волновых дифференциальных уравнений и неустойчивостей с возникновением турбулентности и вихревых движений [4, 5, 12].

Однако даже в рамках простой модели открытой неизолированной системы с обменом с окружающими объектами теплотой и работой удается проанализировать на основе фазовых диаграмм ключевые параметры и режимы работ различных тепловых машин с оценкой максимального количества получаемой теплоты и эффективности их работы на основании термического КПД [1–3, 6, 7]. Этим вопросам посвящена обширная как научно-техническая, так и производственно-технологическая литература.

В данной статье остановимся на двух конкретных демонстрационных примерах: капельной модели возникновения различных структур, включая фрактальные объекты, и на развитии трещиноватых $1D$ -структур и замкнутых полостей $2D$ -конфигураций также фрактального типа в условиях, когда можно проводить аналогию с лазерным управляемым воздействием на поверхность твердого тела (ср. с [4,5,11]).

Эти стохастические модельные фрактальные структуры самоподобия с дробными размерностями (обычно от 1 для $1D$ -структур до 2 для $2D$ -структур, которые будем рассматривать [5, 11]) могут возникать в реальных процессах и установках на поверхности раздела различных фаз, например при различных (начальных) этапах развития кавитационных течений рабочего вещества тепловой машины для процессов пузырькового и/или осаждений пленочного типа и соответственно возможных конфигураций и факторов начала повреждений оболочки и камеры на внутренней поверхности, находящейся в контакте с рабочим веществом тепловой машины [3, 6, 7].

Подобные имитационные модели именно с лазерным излучением, воздействующим на поверхность твердого тела, могут представлять интерес и в прогнозном аспекте возможности исследования режимов и их управляемого регулирования (ср. с [5]) с проведением аналогий для разных используемых на практике оптимальных режимов работы реальных тепловых установок (ср. с [3, 6]).

Модели поверхностных топологических структур определенных типов, индуцированных лазерным излучением в ряде объектов из разных материалов

Изучим результаты экспериментов по капельному осаждению нанокластерных металлических структур на поверхность тела, а также соответствующее математическое моделирование (в относительных условных единицах общего характера) их структуры с использованием фрактальной модели диффузионно-ограниченной агрегации (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)).

Системы нанокластеров металлов на различных поверхностях находят широкое применение в качестве разработки новых эффективных тонкопленочных систем с требуемыми

функциональными и конструкционными характеристиками для материалов, используемых, в частности, для задач создания современных приборов нанoeлектроники и оптофотоники [14, 15]. Однако они представляют интерес и в аспекте отмеченной выше аналогии с конфигурацией дефектов, возникающих на поверхности камеры тепловой установки с жидкостным рабочим веществом, а также для нанесения на поверхность защитных покрытий. Именно этот аспект и рассматривается нами в данном разделе.

Целенаправленная разработка таких материалов с заранее заданными свойствами требует создания новых способов синтеза нанодисперсных фаз металлов и осаждения их на внутреннюю поверхность камеры из различных материалов для создания на ней определенных защитных слоев, обладающих теми или иными функциональными свойствами. Перспективным способом получения подобных нанокластерных систем металлов является капельное осаждение на твердую поверхность из соответствующего по составу коллоида. Это может быть использовано в качестве предварительной модельной системы для нанесения заданной поверхностной структуры, например, на кварцевую и/или керамическую/фарфоровую подложку, что позволяет сгенерировать требуемые покрытия из специальных материалов с необходимой конфигурацией управляемым образом [16]. В дальнейшем данные отработанные технологии могут быть использованы и для поверхности других выбираемых материалов в разных приложениях.

Морфология/топология полученных модельных структур существенным образом зависит от свойств жидкой фракции, частиц коллоида, температуры капли и подложки. Металлические нанокластерные структуры, например серебра (Ag), были получены в результате осаждения капли коллоидного раствора с наночастицами на поверхность подложки при комнатной температуре. Процесс формирования структур рассматривался в результате естественного высыхания капли и/или какого-либо принудительного процесса (нагревания подложки, например), а в нашем рассмотрении – под действием лазерного излучения.

На рис. 1а представлено оптическое изображение структур, полученных в результате естественного высыхания капли воды при темпера-

туре подложки 20 °С за 10 мин, на рис. 1б – нанокластеров после высыхания капли водной компоненты под действием лазерного излучения спустя 20 мин.

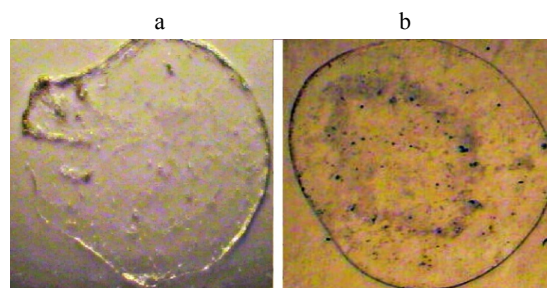


Рис. 1. Оптическое изображение осажденной капли коллоидного раствора и сформированные нанокластеры Ag при температуре 20 °С: а – естественное высыхание; б – высыхание после воздействия лазерного излучения

Fig. 1. Optical image of deposited drop from colloidal solution and formed Ag nanoclusters at 20 °С: а – natural drying; б – drying after exposure to laser radiation

В обоих случаях осажденная система обладала ярко выраженной границей, совпадавшей с границей капли. Как видно из рис. 1, морфология формируемой системы нанокластеров существенно зависит от процесса высыхания капли. При естественном остывании системы температуры подложки и капли коллоида остаются примерно одинаковыми. В это время происходит активное движение наночастиц к границам, но сравнительно медленная скорость испарения позволяет сформировать на границе достаточно обширную кольцевидную систему разветвленных дендритообразных нитевидных нанокластеров с характерным зерном порядка 100 нм шириной и характерной высотой 3 мкм и 150 нм соответственно. При принудительном высыхании жидкой фазы на поверхности при воздействии лазерного излучения температура коллоида увеличивается, высота граничного слоя возрастает и при температуре порядка 100 °С составляет 500 нм (ширина порядка 5 мкм). В этом случае наблюдается более однородное распределение нанокластеров. Они формируются не только на границе, но и внутри, объединяясь во вторую кольцевидную структуру. Система нанокластеров обладает более плотной структурой, в которой можно выделить отдельные кластеры величиной 1,5 мкм, образованные частицами серебра со средними размерами порядка 50 нм.

Их наблюдение можно проводить с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ).

Для изображений систем Ag-нанокластеров, полученных с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ-изображений), проведена оценка фрактальной размерности. Она реализовывалась методом boxcounting [17]. Величина фрактальной размерности варьировалась от 1,65 до 2,02, что соответствовало фрактальным дендритным структурам. В связи с этим в качестве модели структуры системы нанокластеров выбрана модель диффузионно-ограниченной агрегации [18] на круговой расчетной области.

Алгоритм формирования фрактальных кластеров заключается в том, что в круговой расчетной области с наложенной на нее равномерной сеткой генерируются частицы, совершающие по ней случайные блуждания. В случае попадания на границу или в окрестность, содержащую четыре заполненные ячейки (так называемая окрестность Неймана), блуждающая частица фиксируется в текущей позиции с заданной вероятностью p , формируя фрактальный агрегат. Параметр p определяет вероятность локализации частицы/прилипания в данном месте, которая в итоге приводит к образованию нанокластера по данному алгоритму, а темп такого процесса в физическом аспекте обусловлен реализующимся в реальных условиях температурным градиентом на поверхности образца.

На рис. 2 приведены результаты моделирования системы фрактальных нанокластеров в приближении DLA для круговой расчетной области радиусом 400 о. е. Структура формировалась из $2 \cdot 10^4$ частиц. Влияние величины вероятности прилипания на характер системы нанокластеров можно оценить из рис. 2.

При малых значениях вероятности прилипания получаемая фрактальная структура локализуется на краю расчетной области и становится практически равномерно распределенной. Такой режим соответствует естественному остыванию капли коллоида.

Так, на рисунке 1а максимальная ширина/диаметр нанокластерного кольца не превосходит величины 12 о. е. Однако, при средних и больших значениях вероятности прилипания генерируется сильно разветвленная структура (с дендритным характером). Степень заполнения расчетной области в этом случае выше и структуры формируют второе кольцо. Так, на рис. 2b диаметр нанокластерного кольца не превосходит уже 125 о. е., а на рис. 2c – 150 о. е. Результаты такого моделирования могут соответствовать режиму остывания капли жидкости под действием лазерного излучения.

Оценка фрактальных размерностей смоделированных структур показывает тенденцию, аналогичную реальным образцам: с увеличением вероятности прилипания величина фрактальной размерности также возрастает.

На рис. 3 представлены DLA-модели бокового сечения нанокластерных структур при наличии источника теплоты на верхней границе. Расчет температуры T производился на четырех точечных шаблонах (показаны желтым цветом) по явной схеме [18]. Присоединение частицы к агрегату реализовывалось с вероятностью, экспоненциально зависящей от температуры. Таким образом, получалось, что при высокой температуре частица не присоединялась к агрегату. Из рис. 3 можно установить, что рост агрегатов с учетом источников теплоты наблюдается в направлениях против распространения теплоты, но система нанокластеров все-таки остается однородной.

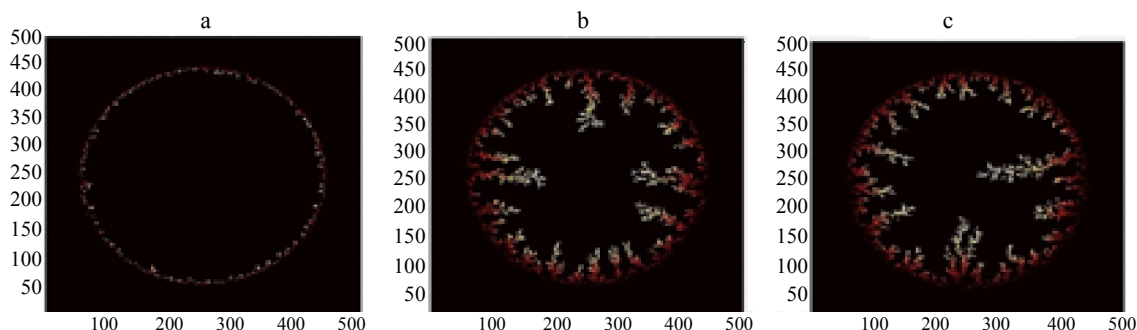


Рис. 2. Модельные изображения фрактальных нанокластерных структур при разной величине вероятности p прилипания: a – 0,1; b – 0,5; c – 1

Fig. 2. Model images of fractal nanocluster structures for different sticking probability parameter p : a – 0.1; b – 0.5; c – 1

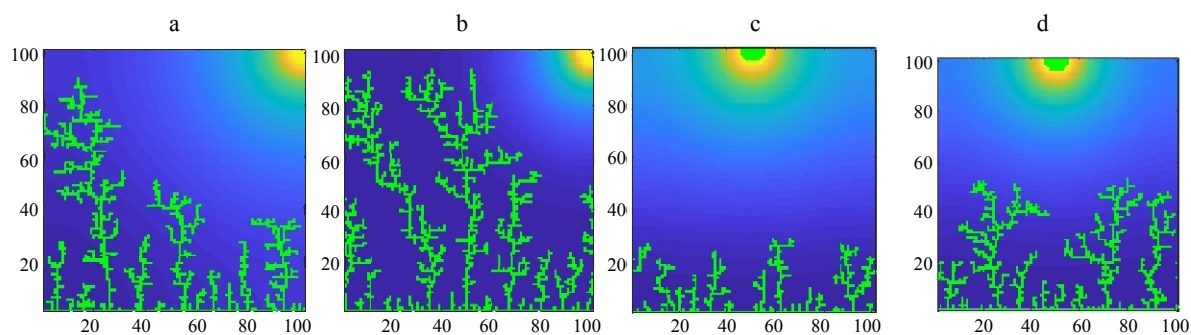


Рис. 3. Модельные изображения фрактальных нанокластерных структур (боковое сечение) с учетом расположения источника теплоты:

a – источник располагается вверху справа – быстрый нагрев; b – медленный нагрев;
c – источник располагается вверху в центре – быстрый нагрев; d – медленный нагрев

Fig. 3. Model images of fractal nanocluster structures (side section) with different localization of heat source:

a – the source is located at the top right – fast heating; b – the same but for slow heating;
c – the source is located at the top in the center – fast heating; d – the same but for slow heating

Для оценки результатов моделирования можно осуществить переход от относительных единиц к абсолютным, усреднить размеры модельных структур и сравнить их с реальными тестовыми образцами. В случае случайных моделей, к которым принадлежат рассмотренные выше, применима качественная оценка на основе сравнения фрактальных размерностей модельных (из литературы) и реальных образцов. Такой подход с достаточной вероятностью позволяет добиться соответствия свойств (например, механических/прочностных, электрофизических или оптических) модельных и реальных образцов при их разнообразных использованиях.

Таким образом, можно утверждать, что представленные модели на качественном уровне могут быть полезными для достаточно верного отображения реально получаемых нано- и микроструктур на поверхностях различных объектов из разных материалов, включая внутренние поверхности камеры тепловой установки.

1D-модель трещиноватой структуры с фрактальными фрагментами

В наиболее наглядном (но в относительных условных единицах) представлении моделирование сложной типологии/топологии возможного появления трещиноватой структуры на поверхности камеры с рабочим веществом можно инициировать с наличия начальных базовых 1D-нитевидных центральных объектов (трещин), с разным числом исходных элементов во фрагменте, определяющих начало и скорость развития трещиноватости в дальнейшем. Данные трещины затем консолидируются в сложные конфигурации и геометрические обра-

зы фрактального типа, понижающие КПД тепловой машины и способствующие ее возможным повреждениям.

В данном пункте большие возможности для изучения таких комплексных 1D-структур доминирующей центральной трещины со случайным ростом дополнительных отрезков трещин фрактального типа определяются с помощью геометрического анализа в рамках соответствующих нелинейных моделей. Нами использовались в этом аспекте две модели для рассмотрения развития возникающих фрактальных трещиноватых структур [17, 18]: во-первых, диффузионное распространение/рост локальных отрезков трещин; во-вторых, с диффузно-ограниченной агрегацией их распространения. Приведем итоговые результаты расчетов для второй модели без деталей их процедуры, что достаточно для наглядного и качественного определения процесса роста трещин. Результаты расчета по первой модели, в принципе, подобны изображениям, полученным по второй модели, но с отличием в численных параметрах.

Не останавливаясь на фиксации определенного количества таких элементарных флуктуационно индуцированных фрактальных отрезков трещин при трансформации исходных линейных трещиноватых цепочек с разным количеством элементов с их объединением в последовательные фрагменты, рассмотрим качественно возникающие модельные конфигурации сети трещин в классификации их морфологии (топологии), которые являются регулируемыми в зависимости от начальных условий. Для количественного анализа потребовался бы учет конкретных характеристик тепловой машины и тех различных взаимодействий (в ее камере как из-

за внешних причин, так и с окружением рабочего вещества в определенном состоянии), под которыми она находится, но при общем сохранении преимущественного 1D-направления в целом [19–22]. Однако это выходит за рамки данного нашего исследования, хотя феноменологически мы учитываем анизотропию по пространственным направлениям при образовании таких фрактальных структур.

Результаты представим в горизонтальной плоскостной проекции разреза камеры. Поскольку все моделирование идет в относительных единицах, конкретные цифры параметров не указываем: ими можно произвольно манипулировать для наглядности разных возможных конфигураций на картинках. С учетом процессов взаимодействия отмечаем принимаемое количество исходных элементов в рассматриваемом фрагменте базовой 1D-трещины.

Результаты проведенного моделирования случайного роста отмеченных дополнительных отрезков трещиноватости показаны на рис. 4 (приближение DLA-модели) для системной сети трещин. Рассмотрено возникновение структуры 1D-трещин, состоящей из разного числа исходных элементов, во фрагментах этих трещин,

которые определяют длину трещины для определенного механизма (с соответствующим физическим потенциалом) взаимодействия в рассматриваемых фрагментах. Он анализируется в теории хрупкого разрушения в физике твердого тела [22], но данные механизмы процессов формирования дефектов и трещин и состояния внутренней поверхности объемного тела находятся в целом вне нашего обсуждения. Сфокусируемся только на геометрических образах и качественной модельной демонстрации разного расположения новых отрезков трещин относительно доминирующей оси возникшей исходной линейной структуры трещин, приведенных на рис. 4. Скорости роста данных дополнительных отрезков к ней и направлений их роста проиллюстрированы в виде геометрических образов относительно преимущественного исходного направления фрагмента 1D-структуры (без фиксации причин выбранных значений относительных параметров, хотя они и отмечены в некоторых условных единицах на координатных осях рис. 4). Именно подобные конфигурации и структуры реально формируются в лазерном эксперименте при разных схемах воздействия излучения на материалы (ср. с [23–25]).

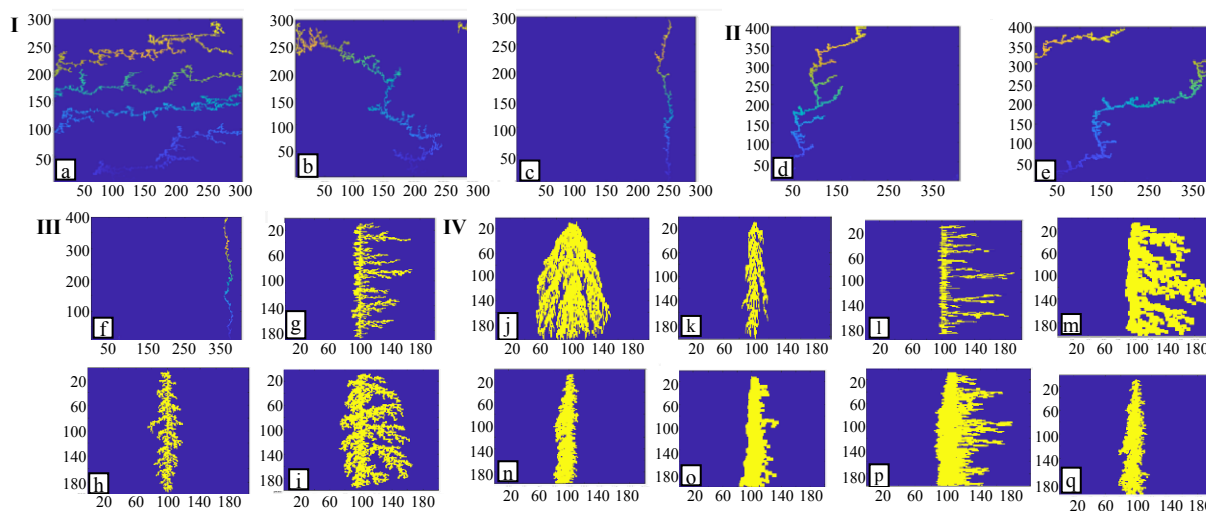


Рис. 4. Результаты расчета фрактальных структур по модели DLA с выделенным преимущественным 1D-ростом трещины (указано как геометрическое название): I – трещины длиной 2 (исходные фрагменты трещины из двух элементов): a – рост по горизонтали; b – рост по диагонали; c – рост по вертикали (вверх); II – диагональные трещины длиной 3 (исходные фрагменты трещины из трех элементов): d – рост вверх; e – рост вбок; III – вертикальные трещины длиной 4 (фрагменты трещины из четырех исходных элементов): f – рост вверх; g – рост направо вбок; h, i – рост симметрично вбок направо и налево, но с разной скоростью; IV – трещины длиной 5 (исходные фрагменты трещины из пяти элементов): рост по вертикали из начального источника наверху (показано выше на рис. 3c), но с разными скоростями и по разным направлениям роста: j, k, l, m, n, o, p, q

Fig. 4. Results of calculation of fractal structures by DLA-model with the selected advantageous 1D-growth for cracks (given as a geometric name): I – cracks of length 2 (original crack fragments of two elements): a – horizontal growth; b – diagonal growth; c – vertical growth (up); II – diagonal cracks of length 3 (original crack fragments of three elements): d – growth (up); e – sideways growth; III – vertical crack of length 4 (fragments of a crack from four initial elements): f – growth (up); g – growth to the right side; h, i – growth symmetrically sideways to the right and left, but at different speeds; IV – cracks of length 5 (original crack fragments of five elements): vertical growth from the initial source at the top (shown above in Fig. 3c) but at different rates and in different directions of growth: j, k, l, m, n, o, p, q

ВЫВОДЫ

1. Рассмотрены модели и алгоритмы различных механизмов осаждения вещества с возникновением поверхностных топологических структур с соответствующими геометрическими параметрами, индуцированных лазерным излучением на определенных и выбранных типах поверхностей, и проведены аналогии с процессами, происходящими с материалом рабочего вещества на внутренних поверхностях камеры тепловой установки.

2. Выявлены условия доминирования появления $1D$ -трещиноватой структуры (в рамках модельных представлений, но без рассмотрения конкретных реальных причин ее возникновения) с последующим случайным ростом ее фрактальных фрагментов/отрезков по разным направлениям и образованием $3D$ -сети с неоднородной картой давлений, влияющих на нежелательные стационарные конфигурации аккумуляции и утечки рабочего вещества в камере энергетической установки из-за случайной проницаемости его в поверхностных дефектах разной глубины.

3. Проведенные исследования, несмотря на всю условность полученных результатов и их качественный характер, могут быть полезными при конструировании различных ответственных деталей и элементов энергетических установок с требуемыми прочностными характеристиками, а также для разработки различных маршрутных карт испытаний с алгоритмами для прогноза последствий их проведения и предварительного планирования допустимых реализуемых рабочих режимов.

4. Показано, что при реализации, например, процессов поверхностного лазерного термоупрочнения с формированием регулируемым образом и в нужном направлении неоднородностей и структур на начальном этапе образования микро- и нанокластеров в лазерных экспериментах оказывается возможным нахождение параметров наиболее потенциально опасных их конфигураций с последующим нежелательным их ростом в динамике.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хрусталева, Б. М. Техническая термодинамика: учеб. для строит. и энергетич. специальностей вузов: в 2 ч. / Б. М. Хрусталева, А. П. Несенчук, В. Н. Романюк. Минск: Технопринт, 2004. Ч. 1. 486 с.
2. Техническая термодинамика: учеб. для машиностроит. специальностей вузов / В. И. Крутов [и др.]; под ред. В. И. Крутова. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1991. 384 с.

3. Несенчук, А. П. Тепловые расчеты пламенных печей для нагрева и термообработки металла / А. П. Несенчук, Н. П. Жмакин. Минск: Вышэйш. шк., 1974. 295 с.
4. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / В. Я. Панченко [и др.]; под ред. В. Я. Панченко. М.: Физматлит, 2009. 664 с.
5. Введение в фемтонанопонику: фундаментальные основы и лазерные методы управляемого получения и диагностики наноструктурированных материалов: учебное пособие / С. М. Аракелян [и др.]; под общ. ред. С. М. Аракеяна. М.: Логос, 2015. 744 с.
6. Benderskiy, V. Numerical Simulation of Intrachamber Process in the Power Plant / V. Benderskiy, P. Frankovskiy, A. Chernova // Applied Sciences. 2021. Vol. 11, No 11. P. 4990. <https://doi.org/10.3390/app11114990>.
7. Convective Heat Transfer In the Channel Entrance with a Square Leading Edge Under Forced Flow Pulsations / I. A. Davletshin [et al.] // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2019. Vol. 129. P. 74–85. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.09.066>.
8. Ильин, А. П. Структура, свойства и проблемы аттестации нанопорошков металлов / А. П. Ильин, А. В. Коршунов, Л. О. Толбанова // Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ]. 2009. Т. 314, № 3: Химия. С. 35–40.
9. Сумм, Б. Д. Коллоидно-химические аспекты нанохимии – от Фарадея до Пригожина / Б. Д. Сумм, Н. И. Иванова. Вестник МГУ. Сер. 2, химия, 2001. Т. 42, № 5. С. 300–305.
10. Страумал, Б. Б. Фазовые переходы на границах зерен / Б. Б. Страумал; Рос. акад. наук. Ин-т физики твердого тела. М.: Наука, 2003. 327 с.
11. Действие излучения большой мощности на металлы / С. И. Анисимов [и др.]; под ред. А. М. Бонч-Бруевича, М. А. Ельяшевича. М.: Наука. 1970. 272 с.
12. Скотт, Э. Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур / Э. Скотт; пер. с англ. И. А. Макарова; под ред. А. Л. Фрадкова. 2-е изд. М.: Физматлит, 2007. 559 с.
13. Гликман, Б. Ф. Математические модели пневмогидравлических систем / Б. Ф. Гликман. М.: Наука, 1986. 368 с.
14. Лепешов, С. И. Гибридная нанопонику / С. И. Лепешов [и др.] // УФН. 2018. Т. 188, № 11. С. 1137–1154. <https://doi.org/10.3367/ufne.2017.12.038275>.
15. Chaudhery, M. H. Handbook of Nanomaterials for Industrial Applications / M. H. Chaudhery. Elsevier, 2018. 1109 p.
16. Осаждение биметаллических кластеров Au/Ag с использованием метода лазерного осаждения наночастиц из коллоидных систем / А. А. Антипов [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 116, № 2. С. 349–352.
17. Guido, G. A Practical Implementation of the Box Counting Algorithm / G. Guido // Computers & Geosciences. 1998. Vol. 24, No 1. P. 95–100. [https://doi.org/10.1016/s0098-3004\(97\)00137-4](https://doi.org/10.1016/s0098-3004(97)00137-4).
18. Mroczka, J. Algorithms and Methods for Analysis of the Optical Structure Factor of Fractal Aggregates / J. Mroczka, M. Wozniak, F. R. A. Onofri // Metrol. Meas. Syst. 2012. Vol. 19, № 3. P. 459–470. <https://doi.org/10.2478/v10178-012-0039-2>.
19. Крайнов, А. Ю. Численные методы решения задач тепло- и массопереноса / А. Ю. Крайнов, Л. Л. Миньков. Томск: STT, 2016. 92 с.
20. Slade, G. Self-Avoiding Walk, Spin Systems and Renormalization / G. Slade // Proceedings of the Royal Society

- A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2019. Vol. 475, Iss. 2221. <https://doi.org/10.1098/rspa.2018.0549>.
21. Geometric Structure of Percolation Clusters / X. Xu [et al.] // *Phys. Rev. E*. 2014. Vol. 89, No 1. P. 012120. <https://doi.org/10.1103/physreve.89.012120>.
 22. Прусова, И. В. Основы механики разрушения: учебно-методическое пособие / И. В. Прусова, В. М. Романчак, О. В. Титюра. Минск: БНТУ, 2009. 100 с.
 23. Григорьянц, А. Г. Оборудование для лазерной обработки / А. Г. Григорьянц, И. Н. Шиганов, А. И. Мисюров; под ред. А. Г. Григорьянц. М.: Изд-во МГТУ, 2022. 285 с.
 24. Gross, M. S. Computer Simulation of the Processing of Engineering Materials with Laser Theory and First Applications / M. S. Gross, I. Black, W. H. Mueller // *J. Phys. D.: Appl. Phys.* 2003. Vol. 36, No 7. P. 929–938. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/36/7/324>.
 25. Абляция тонких пленок молибдена с поверхности прозрачных подложек лазерными импульсами фемтосекундной длительности / А. Е. Гулевич [и др.]. Минск: Беларуская навука, 2012. С. 339–340.
- Поступила 19.01.2023
Подписана в печать 24.03.2023
Опубликована онлайн 31.05.2023
- REFERENCES
1. Khroustalev B. M., Nesenchuk A. P., Romanyuk V. N. (2004) *Technical Thermodynamics. Part 1*. Minsk, Tekhnoprint Publ, 486 (in Russian).
 2. Krutov V. I., Isaev S. I., Kozhinov I. A., Kozlov N. P., Kofanov V. I., Mironov B. M., Nikitin V. N., Petrazhitskii G. B., Pylaev A. M., Khvostov V. I., Shishov E. V. (1991) *Technical Thermodynamics*. 3rd ed. Moscow, Vysshaya Shkola Publ, 384 (in Russian).
 3. Nesenchuk, A. P. Zhmakin N. P. (1974) *Thermal Calculations of Flame Furnaces for Heating and Heat Treatment of Metal*. Minsk, Vysshayshaya Shkola Publ, 295 (in Russian).
 4. Panchenko V. Ya. (ed.), [et al.] (2009) *Laser Technologies for Material Processing: Modern Problems of Fundamental Research and Applied Development*. Moscow, Fizmatlit Publ, 664 (in Russian).
 5. Arakelyan S. M., Kucherik A. O., Prokoshev V. G., Rau V. G., Sergeev A. G. (2015) *Introduction to Femtonanophotonics: Fundamental Principles and Laser Methods for the Controlled Production and Diagnostics of Nanostructured Materials*. Moscow, Logos Publ, 744 (in Russian).
 6. Benderskiy B., Frankovsky P., Chernova A. (2021) Numerical simulation of Intrachamber Process in the Power Plant. *Applied Sciences*, 11 (11), 4990. <https://doi.org/10.3390/app11114990>.
 7. Davletshin I. A., Mikheev N. I., Paereliy A. A., Gazizov I. M. (2019) Convective Heat Transfer In the Channel Entrance with a Square Leading Edge Under Forced Flow Pulsations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 129, 74–85. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.09.066>.
 8. Ilyin A. P., Korshunov A. V., Tolbanova L. O. (2009) Structure, Properties and Problems of Certification of Metal Nanopowders. *Izvestiya Tomskogo Politehnicheskogo Universiteta* [Bulletin of Tomsk Polytechnic University], (3 Khimiya [Chemistry]), 35–40 (in Russian).
 9. Summ B. D., Ivanova N. I. (2001) Colloid-Chemical Aspects of Nanochemistry – From Faraday to Prigizhine. *Vestn. Mosk. Un-ta. Ser. 2. Chemistry*, 42 (5), 300–305 (in Russian).
 10. Straumal B. B. (2003) *Phase Transitions at Grain Boundaries*. Moscow, Nauka Publ, 327 (in Russian).
 11. Anisimov S. I., Imas Ya. A., Romanov G. S., Khodyko Yu. V. (1970) *Effect of High Power Radiation on Metals*. Moscow, Nauka Publ, 272 (in Russian).
 12. Scott A. (2003) *Nonlinear Science: Emergence and Dynamics of Coherent Structures*. Oxford University Press, 480.
 13. Glikman B. F. (1986) *Mathematical Models of Pneumohydraulic Systems*. Moscow, Nauka Publ, 368 (in Russian).
 14. Lepeshov S. I., Krasnok A. E., Belov P. A., Miroschnichenko A. E. (2018) Hybrid Nanophotonics. *Physics-Uspeski*, 61 (11), 1035–1050. <https://doi.org/10.3367/ufne.2017.12.038275>.
 15. Chaudhery M. H. (2018) *Handbook of Nanomaterials for Industrial Applications*. Elsevier, 1109 (in Russian).
 16. Antipov A. A., Arakelian S. M., Kutrovskaya S. V., Kucherik A. O., Vartanian T. A. (2014) Deposition of Bimetallic Au/Ag Clusters Using Laser Deposition of Nanoparticles from Colloidal Systems. *Optics and Spectroscopy*, 116 (2), 324–327. <https://doi.org/10.1134/s0030400x14020039>.
 17. Guido G. (1998) A practical Implementation of the Box Counting Algorithm. *Computers & Geosciences*, 24 (1), 95–100. [https://doi.org/10.1016/s0098-3004\(97\)00137-4](https://doi.org/10.1016/s0098-3004(97)00137-4).
 18. Mrocza J., Wozniak M., Onofri F. R. A. (2012) Algorithms and Methods for Analysis of the Optical Structure Factor of Fractal Aggregates. *Metrology and Measurement Systems*, 19 (3), 459–470. <https://doi.org/10.2478/v10178-012-0039-2>.
 19. Kraynov A. Yu., Minkov L. L. (2016) *Numerical Methods for Solving Problems of Heat and Mass Transfer*. Tomsk, STT Publ, 92 (in Russian).
 20. Slade G. (2019) Self-Avoiding Walk, Spin Systems and Renormalization. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 475 (2221), 20180549. <https://doi.org/10.1098/rspa.2018.0549>.
 21. Xu X., Wang J., Zhore Z., Garoni T. M., Deng Y. (2014) Geometric Structure of Percolation Clusters. *Physical Review E*, 89 (1), 012120. <https://doi.org/10.1103/physreve.89.012120>.
 22. Prusova I. V., Romanchak V. M., Tityura O. V. (2009) *Fundamentals of Fracture Mechanics: Teaching Aid*. Minsk, Belarusian National Technical University. 100 (in Russian).
 23. Grigoryants A. G., Shiganov I. N., Misyurov A. I. (2022) *Laser Processing Equipment*. Moscow, Bauman Moscow State Technical University, 285 (in Russian).
 24. Gross M.S., Black I., Mueller W. H. (2003) Computer simulation of the Processing of Engineering Materials with Laser Theory and First Applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36 (7), 929–938. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/36/7/324>.
 25. Gulevich A. E., Kisel' V. E., Kuleshov N. V., Rudenkov A. S. (2012) Ablation of thin Films of Molybdenum From the Surface of Transparent Substrates by Femtosecond Laser Pulses. Minsk, Belaruskaya Navuka Publ, 339–340 (in Russian).

Received: 19.01.2023

Accepted: 24.03.2023

Published online: 31.05.2023