# МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА АЛГОРИТМИ



## Про формування щільності вуглецевих композитів з газової фази за умов термоградієнту

В.О. СКАЧКОВ, В.І. ІВАНОВ, О.М. ІСАЄНКО

#### Запорізька державна інженерна академія

Розроблено математичну модель формування щільності карбонізованих вуглецевих композитів з газової фази, яка враховує процеси транспортування газоподібних вуглеводнів до пористої структури матеріалу, їхнє розкладання та утворення піролитичного вуглецю на нагрітих поверхнях пор за умов термоградієнту.

Разработана математическая модель формирования плотности карбонизованных углеродных композитов из газовой фазы, которая учитывает процессы транспортировки газообразных углеводородов в пористую структуру материала, их разложения и образования пиролитического углерода на нагретых поверхностях пор в условиях термоградиента.

It is developed the mathematical model for density forming of carbonized carbon composites from a gas phase, whicludes the processes of gaseous hydrocarbons transportation in the porous structure of material, their decomposition and formation of pyrolytical carbon on the heated pores surfaces in the thermogradient conditions.

Властивості композитів на основі вуглецю залежать від структури матеріалу, яка характеризується розташуванням армуючих волокон, їхнім об'ємним вмістом і пористістю самого матеріалу. Зниження пористості таких композитів сягається шляхом реалізації процесу заповнення їхньої структури вуглецем із застосуванням методів рідкофазового або газофазового ущільнення. До газофазових методів належить газотермічне або термоградієнтне ущільнення [1,2].

У роботі [1] розглянуто механізм термоградієнтного ущільнення пористих матеріалів, а в роботі [2] проведено загальний аналіз газофазових методів ущільнення. Актуальним залишається питання змінювання щільності композиту щодо товщини за умов газофазового ущільнення. У роботі [3] вивчено формування щільності вуглецевих композитів з газової фази за умов ізотермічного нагріву. Проте ізотермічні методи застосовуються для ущільнення тонкостінних виробів під час двостороннього підведення реакційного газу. Для товстостінних виробів переважним є термоградієнтний метод газофазового ущільнення, який характеризується змінним полем температури щодо товщини композиту, що обумовлено змінюванням коефіцієнтів теплопровідності пористого композиту та піролитичного вуглецю. В зв'язку з цим ставиться завдання з використанням математичного моделювання проаналізувати процес формування щільності вузлецевих композитів з газової фази за умов термоградієнтного методу.

Розглядається модель вуглецевого композиту, поданого пластиною товщиною  $\delta$ , яка має циліндрові пори, що є перпендикулярними до поверхні, з ефективним радіусом  $r_{e\phi}$  і пористістю П. Поверхня пор є глад-

кою та енергетично однорідною. Поверхня з координатою  $\ell = 0$  нагріта до температури  $T_3$ , а поверхня з координатою  $\ell = \delta$  омивається реакційним газом з температурою  $T_{\Gamma}$ .

Розподіл температури щодо товщини модельного середовища описували диференціальним рівнянням теплопровідності [4]

$$c\rho \ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial \ell} \right)$$
(1)

Для рівняння (1) виконуються краєві умови  $T \mid_{\ell=0} = T_B;$  (2)

$$\left. \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\ell = \delta} = \alpha \cdot (T_3 - T_{\Gamma}); \qquad (3)$$

$$T(0,\ell) = T_0$$
, (4)

де с – теплоємність вуглецевого композиту, кДж/(кг·К);  $\rho$  – поточна масова щільність композиту, г/м<sup>3</sup>; Т – температура, К;  $\ell$  – поточна лінійна координата, м;  $T_{\rm B}$  – температура внутрішньої поверхні композиту, К;  $T_{\rm 3}$  – температура зовнішньої поверхні композиту, К;  $T_{\rm r}$  – температура реакційного газу, К;  $T_0$  – початкова температура вуглецевого композиту, К.

У рівнянні (1) не враховано відведення теплоти, що обумовлено проходженням екзотермічних реакцій розкладання реакційних газів.

Коефіцієнт теплопровідності композиту, значення якого залежить від змінювання пористості даного матеріалу, з урахуванням результатів роботи [5] можна записати у вигляді

$$\lambda = \lambda_{\kappa} \frac{\rho_0}{\rho} + \lambda_{\pi y} \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right), \tag{5}$$

де  $\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності, Вт/(м·К);  $\lambda_{\kappa}$  – коефіцієнт теплопровідності пористого композиту, Вт/(м·К);  $\lambda_{ny}$  – коефіцієнт теплопровідності піролітичного вуглецю, Вт/(м К);  $\rho_0$  – початкова масова щільність композиту, кг/м<sup>3</sup>.

Рівняння (1) з урахуванням співвідношення (5) має вигляд

$$c \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\rho_0}{\rho} \left( \lambda_{\kappa} \frac{\partial \rho}{\partial \ell} \frac{\partial T}{\partial \ell} + \lambda_{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial \ell^2} \right), \qquad (6)$$

 $\label{eq:constraint} \begin{array}{ll} { }_{\mathcal{A} \rho} = \lambda_{\kappa} - \lambda_{\pi y} \! \left( 1 \! - \! \frac{\rho}{\rho_0} \right). \end{array}$ 

Під час реалізації термоградієнтного методу ущільнення температура реакційного газу в об'ємі реактора є значно нижчою ніж її межове значення, що характеризує початок протікання гомогенних процесів [6]. Об'єм природного газу, що дифундує до пористої структури композиту, є достатньо малим, тому гомогенними процесами в окремій порі також можна нехтувати.

За цих умов рівняння дифузії природного газу до пори з урахуванням його розкладання на її поверхні для даного методу ущільнення можна подати як

$$\frac{1}{D} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial \ell^2} + \theta \frac{\partial C}{\partial \ell} - \frac{2k}{r_{e\varphi} \cdot D} , \qquad (7)$$
$$\cdot \exp[K \cdot \exp(\beta \cdot \ell) - \theta \cdot \ell] \cdot C = 0$$

де D – коефіцієнт дифузії реакційного газу, м<sup>2</sup>/c; k – константа швидкості утворення піролитичного вуглецю, м/c;  $r_{e\phi}$  – ефективний радіус циліндрової пори, м;  $\beta$  – коефіцієнт швидкості передавання маси, м/c;

$$\begin{split} \mathbf{K} = -\frac{\mathbf{E}}{\mathbf{R} \cdot \mathbf{T}_{\mathrm{H}}} \quad ; \quad \mathbf{\theta} = \mathbf{1}, \mathbf{5} \; \boldsymbol{\beta} \; ; \quad \mathbf{\beta} = \frac{1}{\delta} \cdot \ln \left( \frac{\mathbf{T}_{\mathrm{B}}}{\mathbf{T}_{\mathrm{H}}} \right) \\ \mathbf{D} = \mathbf{D}_{\mathrm{H}} \cdot \left( \frac{\mathbf{T}}{\mathbf{T}_{\mathrm{H}}} \right)^{1,5} \; , \end{split}$$

де Е – енергія активації створення піролитичного вуглецю, кДж/кг; R – універсальна газова постійна, Дж/(К·моль);  $T_{\rm H}$  – температура зовнішньої поверхні композиту, K;  $T_{\rm B}$  – температура внутрішньої поверхні композиту, K,  $D_{\rm H}$  – коефіцієнт дифузії реакційного газу за температури  $T_{\rm H}$ , м<sup>2</sup>/с.

Межові умови для рівняння (7) можна записати у вигляді

$$\mathbf{C}(\tau) \Big|_{\epsilon = \infty} = \mathbf{C}^{\Pi} ; \qquad (8)$$

:

$$C(\ell, 0) = C^{\Pi}$$
; (9)

$$-D\frac{\partial C}{\partial \ell} = \beta_{\rm m} \cdot (C^{\rm m} - C_0) \quad . \tag{10}$$

де  $C^{\Pi}$  – концентрація метану біля поверхні композиту, кг/м<sup>3</sup>;  $C_0$  – концентрація метану в реакторі, кг/м<sup>3</sup>;  $\beta_{m}$ -коефіцієнт швидкості передавання маси, м/с;  $\delta$  – товщина стінки заготовки з вуглецевого композиту, м.

Змінювання щільності щодо товщини вуглецевого композиту описується рівнянням.

$$-\vartheta \frac{d\rho}{d\ell} = S_i \cdot k \cdot C \tag{11}$$

з межовою умовою

$$\rho \Big|_{\ell=\delta} = \rho_0 \quad , \tag{12}$$

де 9. — швидкість росту піролитичного вуглецю, м/с;  $S_i$  — питома реакційна поверхня пор композиту, м $^2/{\rm kr}.$ 

Питома реакційна поверхня пор визначається співвідношенням

$$S_{i} = \frac{2(\rho_{\pi} - \rho)}{r_{e\phi} \cdot \rho_{\pi} \cdot \rho} , \qquad (13)$$

де  $\rho_{,a}$  – дійсна щільність матеріалу карбонізованого вуглепластика, кг/м<sup>3</sup>.

Після підстановки співвідношення (13) до рівняння (11) одержимо

$$-\vartheta \frac{d\rho}{d\ell} = \frac{2(\rho_{\pi} - \rho)}{r_{e\varphi} \cdot \rho_{\pi} \cdot \rho} k \cdot C$$
(14)

Система рівнянь (6), (7) і (14) з межовими умовами (2)-(4), (8)-(10) і (12) описує процеси розподілу температури щодо товщини вуглецевого композиту, що ущільнюють, з урахуванням дифузії реакційного газу до пористої структури матеріалу та осадження на стінках пор піролитичного вуглецю, який обумовлює зниження пористості та збільшення щільності даного матеріалу.

Розв'язання запропонованої системи диференціальних рівнянь, реалізовано чисельними методами. Алгоритм розрахунку забезпечує визначення розподілу температури щодо товщини вуглецевого композиту, що ущільнюють, змінювання концентрації та швидкості розкладання реакційного газу щодо товщини стінки даного матеріалу, а також змінювання його щільності.

Розрахункові дослідження проводили для природного газу, що складається з 96,30% CH<sub>4</sub>; 0,50% C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>; 0,35% C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>; 0,05% C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>; 2,0% H<sub>2</sub>; 0,80% N<sub>2</sub>. Температура внутрішньої стінки T<sub>в</sub> дорівнювала 1100°С, початкова щільність  $\rho_0$  карбонізованого вуглецевого матеріалу -1,09 г/см<sup>3</sup>. Результати обчислень подано на рисунку 1.



Рис. 1. Розподіл щільності вуглецевого композиту щодо товщини під час ущільнення в середовищі природного газу: 1 - 0,1  $\tau_{n:.}$  2 - 0,3  $\tau_{n:.}$  3 - 0,5  $\tau_{n:.}$  4 -  $\tau_{n}$ ( $\tau_{n}$  - тривалість процесу ущільнення композиту з газової фази, с)

Характерним є той факт, що щільність ущільненого вуглецевого композиту в центрі заготовки на 3-4%є нижчою, ніж у області обох поверхонь. Залежність розподілу щільності вуглецового композиту щодо його товщини за умов термоградієнту, що подана на рисунку, відповідає виводам роботи [1]. Одержане розв'язання поставленого завдання дозволяє задавати технологічні параметри процесу ущільнення вуглецевих композитів з газової фази за умов термоградієнту. Результати експериментальних досліджень процесу ущільнення карбонізованих композитів в середовищі природного газу підтвердили достатню їхню збіжність до результатів, одержаних за допомогою розробленої моделі.

Проведене дослідження свідчить про достовірність запропонованої моделі формування щільності вуглецевих композитів з газової фази та її застосовність для кількісної оцінки розподілу щільності матеріалу щодо товщини стінки заготовки під час її ущільнення за умов термоградієнту.

#### ЛІТЕРАТУРА

 Гурин В.А., Гурин И.В., Фурсов С.Г. Исследование газофазного уплотнения пироуглеродом пористых сред методом радиально движущейся зоны пиролиза / Вопросы атомной науки и техники. 1999. Вып. 4 (76). С.32-45.

- Скачков В.О., Іванов В.І., Карпенко В.Д. Моделювання й аналіз методів газофазового ущільнення поруватих вуглець-вуглецевих композитів // Математичне моделювання. 2004. № 2 (12). С.47-51.
- Скачков В.О., Іванов В.І., Нестеренко Т.М. та інш. Модель процесу формування густини вуглецевих композиційних материіалів // Математичне моделювання. 2000. № 2 (5). С.74-78.
- 4. Волков С.Д., Ставров В.П. Статистическая механика композитных материалов. Минск, БГУ, 1978. 206 с.
- 5. Лыков А.В. Тепломассообмен. М.: Энергия, 1972. 554 с.
- Скачков В.А., Иванов В.И., Середич В.И. и др. Моделирование процесса разложения углеводородов в термохимических реакторах проточного типа // Известия Вузов. Черная металлургия. 1991. № 12. С.33-35.

пост. 05.01.06.

## Радиационный нагрев массивного призматического слитка

### Ю.С. ПОСТОЛЬНИК, О.А. ЧЕРНЫЙ

#### Днепродзержинський государственный технический университет

Широкое распространение объектов призматической формы в теплотехнике требует разработки расчета их температурного состояния. В случае термомассивных тел это возможно на основе теории теплопроводности, краевые задачи которой при наличии нелинейности точных решений не имеют. Практика вынуждена пользоваться приближенным математическим моделированием. В работе при помощи метода эквивалентных источников (МЭИ) Ю.С. Постольника получено приближенное аналитическое решение задачи термоупругости длиной прямоугольной призмы в условиях радиационного нагрева (нелинейности II - го рода).

Широке розповсюдження об'єктів призматичної форми в теплотехніці вимагає розробки розрахунку їх температурного стану. У разі термомассивних тіл це можливо на основі теорії теплопровідності, краєві задач якої за наявності нелінійності точних розв'язків не мають. Практика вимушена користуватися наближеним математичним моделюванням. В роботі за допомогою методу еквівалентних джерел (МЕД) Ю.С. Постольника одержано наближений аналітичний розв'язок задачі термопружності довгої прямокутної призми в умовах радіаційного нагріву (нелінійність ІІ - го роду).

Wide distribution of objects of prismatic form in a heating engineering requires development of calculation of their temperature being. In the case of termomassivnih bodies it is possible on the basis of theory of heat conductivity, the regional tasks of which at presence of non-linearity of exact decisions are not had. Practice is forced to use the close mathematical design. In work through the method of the equivalent sources Yu.S.Postolnika the close analytical decision of task of termouprugosti is got long rectangular prism in the conditions of the radiation heating (non-linearity II family).

Введение. Состояние вопроса. Исследование процессов высокотемпературного нагрева массивных призматических тел при нелинейных граничных условиях (ГУ) Стефана-Больцмана встречает известные математические трудности. Поэтому такие задачи, как правило, решаются численными методами и заканчиваются, в лучшем случае, набором графиков или таблиц, практическое использование которых ограничено диапазоном варьирования исходных параметров. И если такая форма решения может быть более-менее удовлетворительной при расчетах температурного состояния (TC) тела, то для исследования термонапряженного состояния (THC) она практически неприемлема. Это объясняется неудобствами, обусловленными дискретным заданием температурного поля.

Поэтому особую значимость приобретают приближенные аналитические методы, позволяющие рассчитать температуру тела в любой точке в произвольный момент времени. Для нелинейных задач теплопроводности призматических тел таких методов крайне мало. Наиболее известны методы [1, 2], основной сутью которых является линеаризация граничных условий при помощи специальных преобразований, после чего решения линеаризованных краевых задач осуществляется известными [3] точными методами. Но эти точные решения, представленные неограниченными двойными